Федеральное агентство по образованию
ГОУ ВПО «Российский государственный профессионально-педагогический университет»
Уральское отделение Российской академии образования
Академия профессионального образования

В. П. Верещагин, Е. Н. Горелов, А.Н. Кислов

Кристаллография ориентационных инвариантов однородного деформационного преобразования ГЦК → ОЦК (ОЦТ) кристаллических решеток при собственно деформации ГЦК-решетки по Бейну

Екатеринбург
2006

УДК 539.2:514.87
ББК В37
В 31

Верещагин В. П., Горелов Е. Н., Кислов А. Н. Кристаллография ориентационных инвариантов однородного деформационного преобразования ГЦК → ОЦК (ОЦТ) кристаллических решеток при собственно деформации ГЦК-решетки по Бейну. Екатеринбург: Изд-во ГОУ ВПО «Рос. гос. проф.-пед.ун-т», 2006. 205 с.

ISBN 978-5-8050-0222-0

Изучается кристаллография ГЦК → ОЦК (ОЦТ) мартенситного превращения. Собственно деформация ГЦК-решетки в ОЦК (ОЦТ)-решетку, и деформация Бейна в частности, находится из уравнений, выражающих определение мартенситного механизма превращения фаз по Г. В. Курдюмову. Для построения деформации с инвариантной плоскостью используется формализм ориентационных инвариантов деформационного преобразования и преобразования размерности инвариантных подпространств, в рамках которого изучение сопряжения фаз по кристаллографическим плоскостям сводится к изучению кристаллографии ориентационных инвариантов.

Книга предназначена для специалистов в области физики твердого тела, аспирантов и студентов технических специальностей.

Рецензенты: доктор физико-математических наук, профессор В. В. Кондратьев (Институт физики металлов УрО РАН); кандидат физико-математических наук, доцент В. В. Бухаленков (ГОУ ВПО «Российский государственный профессионально-педагогический университет»)

ISBN 978-5-8050-0222-0

Введение

Методы создания конструкционных материалов основываются на использовании закономерных связей между физико-химическими свойствами металлов и сплавов и их внутренним строением. Одним из основных средств, позволяющих на практике перестраивать структуру металлов и сплавов, служат фазовые превращения. Последние заключаются нередко в изменении кристаллической структуры, характерной чертой которого является кооперативность перестройки кристаллической решетки. Классическим примером превращения такого типа служит $\gamma - \alpha$ мартенситное превращение (МП) в сплавах железа [1]. Изучение именно этого превращения привело к осознанию специфики бездиффузионных структурных переходов и положило начало развитию представлений об особом, мартенситном, механизме перехода [1], который, как выяснилось, вообще типичен для превращений кристаллической структуры в условиях подавления диффузионных процессов. Последнее обстоятельство объясняет интерес к мартенситной проблематике со стороны не только прикладной, но и фундаментальной науки и служит важнейшим стимулом для развития теории $\gamma - \alpha$ МП в сплавах железа.

Одно из направлений развития теории $\gamma - \alpha$ МП связано с изучением закономерностей механизма превращения, проявляющих себя в кристаллографии и морфологии мартенситной фазы. Теория кристаллографии мартенсита основывается [см., напр., 15] на постулате о локальном соответствии решеток, следующем из экспериментально установленных фактов существования ориентационного соответствия между решетками превращающихся фаз и макроскопического изменения формы превращающейся области аустенита. Перестройка кристаллической решетки в пределах об-

---

[1] В случае $\gamma - \alpha$ МП высокотемпературная фаза, именуемая аустенитом, имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, обозначаемую сокращенно γ. Под термином «мартенсит» подразумевается структурная составляющая, которая возникает бездиффузионно при охлаждении сплава и имеет либо объемноцентрированную кубическую (ОЦК) решетку, либо объемноцентрированную тетрагональную (ОЦТ) решетку; и та и другая обозначаются сокращенно α. ОЦТ-решетка типична для сплавов внедрения (Fe-C, Fe-N), причем величина тетрагональности растет с ростом концентрации внедренного компонента. Для мартенсита сплавов замещения (Fe-Ni, Fe-Mn) более характерна ОЦК-решетка. Основные черты $\gamma - \alpha$ МП в сплавах железа, особенности предмартенситного состояния и ретроспектива исследований отражены во многих публикациях [1 – 14].

ластей, в которых соответствие решеток выполняется, эквивалентна однородной деформации, преобразующей одну решетку в другую; изменение формы, связанное с превращением, также является однородной деформацией, при которой габитусная плоскость кристалла мартенсита[1] не искажается и не поворачивается. Геометрия конечной однородной деформации представляет значительный интерес при рассмотрении кристаллографии мартенсита. К кристаллографическим характеристикам превращения относят ориентационные соотношения между решетками исходной и конечной фаз, габитусную плоскость мартенситной пластины и характер макроскопического изменения формы области, испытавшей превращение. Задача теории состоит в том, чтобы объяснить все эти характеристики, зная кристаллическую структуру превращающихся фаз и параметры их решеток.

Разработке кристаллографической теории мартенситных превращений посвящено множество исследований. Достаточно полную картину эволюции представлений, составивших фундамент теории, можно получить, например, из обзоров [10 – 12]. Что же касается состояния теории в целом, то его нельзя признать удовлетворительным. Об этом свидетельствуют неспособность ее объяснить с единой точки зрения детали отдельных превращений, малоубедительность гипотез, устраняющих расхождение предсказаний теории с экспериментом и, как следствие, неконструктивность теории в плане построения конкретных моделей превращения, а также интерпретации связей между морфологическими характеристиками отдельного кристалла мартенсита и процессом его образования, проходящим через стадии зарождения и роста.

В подобной ситуации обоснованной представляется постановка задачи, включающей в себя критический анализ и пересмотр фундамента существующей кристаллографической теории с использованием нового подхода [16] к изучению кристаллографии превращения, в рамках которого все свойства деформационного преобразования одной решетки в другую, включая и возможность преобразования посредством деформации с инвариантной плоскостью, рассматриваются последовательно с геометрической точки зрения, учитывающей только взаимное расположение узлов в решетках, связанных преобразованием. Решение этой задачи и является целью настоящей работы.

---

[1] Наиболее типичной структурной формой мартенситной фазы является пластина с малым отношением толщины к другим линейным размерам. Габитусная плоскость пластины – это ее плоские грани или средняя плоскость, если грани сильно изрезаны.

Глава 1. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ОРТОГОНАЛЬНОЙ ЧАСТИ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

В ранее опубликованном исследовании [16] рассматривалась перестройка одной кристаллической решетки, обозначаемой через X, в другую решетку, обозначаемую через r, путем однородной деформации:

$$\mathbf{r} = \mathbf{L}\mathbf{X}\,, \tag{1.1}$$

где **X** и **r** – радиус-векторы, определяющие положение одного и того же узла в решетках X и r относительно узла решетки X, принятого за начало O.

Определению подлежал тензор **L**, отображающий решетку X в решетку r, при заданном расположении узлов в каждой из решеток в отдельности.

Такой постановке задачи отвечает разложение тензора **L** в произведение

$$\mathbf{L} = \mathbf{\Omega}\mathbf{E}, \tag{1.2}$$

симметричного **E** и ортогонального **Ω** тензоров [17], позволяющее трактовать преобразование (1.1) как последовательность преобразований. Первое ответственно за изменение расположения узлов, характерного для решетки X, в расположение узлов, характерное для решетки r, т. е. за собственно деформацию одной решетки в другую. Второе – за изменение взаимной ориентации решеток. Симметричная часть тензора **L** находится из уравнений, следующих из определения мартенситного превращения фаз по Г. В. Курдюмову. Если уравнения эти имеют несколько решений $\mathbf{E}^{(\nu)}$, $\nu = 1, 2, \ldots$, то несколько решений

$$\mathbf{L}^{(\nu)} = \mathbf{\Omega}\mathbf{E}^{(\nu)}\,, \qquad \nu = 1, 2, \ldots \tag{1.3}$$

будет иметь и уравнение (1.2), выражающее тензор **L** через его симметричную часть. Именно так обстоит дело в случае $\gamma \to \alpha$ перестройки, если α – ОЦТ-решетка. Тогда собственно деформация решетки γ в решетку α реализуема [16] тремя способами:

$$\mathbf{E}^{(1)} = \kappa\sqrt{2}\,\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_1 + \kappa\tau\sqrt{2}\,\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_2 + \kappa\,\mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_3\;; \tag{1.4а}$$

$$\mathbf{E}^{(2)} = \kappa\tau\sqrt{2}\,\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_1 + \kappa\sqrt{2}\,\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_2 + \kappa\,\mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_3\;; \tag{1.4б}$$

$$\mathbf{E}^{(3)} = \kappa\sqrt{2}\,\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1 + \kappa\sqrt{2}\,\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2 + \kappa\tau\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3 \ , \qquad (1.5)$$

где $\kappa = a_\alpha / a_\gamma$, $\tau = c_\alpha / a_\alpha$; a_γ – параметр γ-решетки; a_α, c_α – параметры α-решетки; $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ – правая тройка взаимно перпендикулярных ортов ($\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$ направлены в γ-решетке вдоль осей симметрии второго порядка, а $\mathbf{e}_3$ – вдоль оси симметрии четвертого порядка).

Символ вида $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$, используемый в (1.4), (1.5), а также символы $[\mathbf{a},\mathbf{b}]$, $(\mathbf{a},\mathbf{b})$, используемые ниже в тексте, означают соответственно тензорное, векторное, скалярное произведения векторов; действие тензора $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ на вектор $\mathbf{c}$ определяется правилом $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}\ \mathbf{c} = \mathbf{a}(\mathbf{b}, \mathbf{c})$.

Решения (1.3) исчерпывают множество тензоров, отображающих решетку X в решетку r, так как все варианты собственно деформации решетки X в решетку r исчерпываются решениями $\mathbf{E}^{(\nu)}$, $\nu = 1, 2, \ldots$, совместимыми с мартенситным механизмом превращения фаз. Поэтому задачу о деформационном преобразовании решеток X и r можно считать решенной, если для каждого $\mathbf{E}^{(\nu)}$, указано ортогональное преобразование $\mathbf{\Omega}$.

Преобразование $\mathbf{\Omega}$ при заданном $\mathbf{E}$ [1] изменяет только ориентацию решетки, полученной из решетки X в результате собственно деформации, и является тензорной функцией параметров Ψ и $\boldsymbol{\lambda}$, а именно

$$\mathbf{\Omega} = \cos\Psi\, \mathbf{I} + (1 - \cos\Psi)\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\lambda} + \sin\Psi\, \mathbf{U}_\lambda \ , \qquad (1.6)$$

где Ψ – угол поворота; орт $\boldsymbol{\lambda}$ задает ориентацию оси поворота; $\mathbf{U}_\lambda$ – антисимметричный оператор, действие которого на произвольный вектор $\mathbf{X}$ определяется правилом $\mathbf{U}_\lambda\, \mathbf{X} = [\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{X}]$.

Поэтому вопрос о выделенности $\mathbf{\Omega}$ – это вопрос о выделенности ориентационного соответствия между решетками X и r, который следует решать, исходя из принципов, учитывающих не только взаимное расположение узлов в каждой из решеток, но и расположение одной решетки относительно другой.

1.1. Деформация с инвариантной плоскостью

Сопряжение фаз с различными кристаллическими решетками предполагает взаимную аккомодацию этих решеток, компенсирующую их не-

---

[1] Здесь и далее, где это не приводит к недоразумениям, индекс ν при **E** для сокращения записи опускается.

совпадение на границе раздела фаз. Аккомодация может происходить путем упругих искажений решеток, а также неупругих, связанных с образованием дислокаций несоответствия и конденсацией вакансий на границе раздела фаз. Однако только упругие искажения являются источником внутренних напряжений. Поэтому выделенным можно считать такое сопряжение фаз, при котором совмещаются кристаллические плоскости фаз, характеризуемые минимальным расхождением в положениях атомов. Тогда упругие смещения атомов в плоскости границы будут иметь минимальную величину и, соответственно, минимальной будет энергия внутренних напряжений.

Необходимость в компенсирующих упругих смещениях отпадает вовсе, если деформационная перестройка одной решетки в другую при фазовом превращении совместима с существованием плоскости, не испытывающей деформации. Плоскость, не испытывающая деформации при перестройке одной решетки в другую, есть плоскость, общая (в смысле совпадения всех узлов) для обеих решеток. Сопряжение фаз по плоскости, общей для решеток этих фаз, является идеальным, так как не требует компенсирующих упругих смещений, приводящих к внутренним напряжениям. Плоскость сопряжения, обладающая указанными свойствами, называется в литературе инвариантной плоскостью, а деформация, не изменяющая взаимное расположение узлов в параллельных плоскостях преобразуемой решетки и ориентацию этих плоскостей, называется деформацией с инвариантной плоскостью.

Вид тензора $\mathbf{L}$, отображающего одну решетку в другую в случае деформационного преобразования с инвариантной плоскостью, найти нетрудно, учитывая, что соответствие между радиус-векторами $\mathbf{X}_1$, $\mathbf{X}_2$ и $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, определяющими положение узлов в плоскости, общей для преобразуемой X и преобразованной r решеток, устанавливается равенствами $\mathbf{r}_1 = \mathbf{X}_1$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{X}_2$. Равенства эти позволяют выразить $\mathbf{L}$ [16] формулой

$$\mathbf{L} = \mathbf{I} + \mathbf{u}_3 \cdot \mathbf{X}^3, \tag{1.7}$$

где $\mathbf{u}_3 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{X}_3$.

Легко видеть, что тензор (1.7) согласуется с представлениями о деформации, при которой всякая плоскость решетки X, задаваемая нормалью

$$\mathbf{N} = \mathbf{X}^3 / |\mathbf{X}^3|, \tag{1.8}$$

перемещается поступательно как целое, не испытывая в остальном никаких изменений [1].

Следует, однако, иметь в виду, что наличие плоскости, общей для решеток X и r, зависит только от взаимного расположения узлов в каждой из них, поэтому критерии, позволяющие судить о возможности или невозможности преобразования решетки X в решетку r посредством деформации с инвариантной плоскостью, должны выражаться через параметры собственно деформации **E**. В связи с этим уместно отметить, что симметричная часть $\mathbf{E} = \sqrt{\mathbf{L}^{*}\mathbf{L}}$ тензора (1.7) имеет вид

$$\mathbf{E} = \mathbf{I} + \sum_{k=1}^{2}(E_k - 1)\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_k ,$$

где

$$\mathbf{e}_k = [\mathbf{N} - (-1)^k(\mathbf{s} / |\mathbf{s}|)] \, / \, |\mathbf{N} - (-1)^k(\mathbf{s} / |\mathbf{s}|)| , \quad \mathbf{s} = |\mathbf{X}^3|(\mathbf{u}_3 + |\mathbf{u}_3|^2 \mathbf{X}^3 /2) ;$$

N определяется формулой (1.8).

Для нее характерны собственные значения $E_1 = \sqrt{1 + (\mathbf{s},\mathbf{N}) + |\mathbf{s}|}$, $E_2 = \sqrt{1 + (\mathbf{s},\mathbf{N}) - |\mathbf{s}|}$, $E_3 = 1$, одно из которых больше единицы (или равно ей при $(\mathbf{N}, \mathbf{s}) = -|\mathbf{s}|$), другое меньше единицы (или равно ей при $(\mathbf{N}, \mathbf{s}) = |\mathbf{s}|$), а третье равно единице. Именно такие свойства и отличают собственно деформацию **E** в тех случаях, когда взаимное расположение узлов в решетках X и r допускает преобразование X в r посредством деформации с инвариантной плоскостью [см., напр., 15]. Наглядным свидетельством тому служит геометрическая картина деформационного преобразования воображаемого сферического объема кристалла, имеющего радиус, равный единице. Однородная деформация

$$\mathbf{r} = \mathbf{E}\mathbf{X} \tag{1.9}$$

превращает этот объем в эллипсоид с полуосями, равными собственным значениям E_1, E_2, E_3 тензора **E**. Поверхности эллипсоида и сферы пересекаются, если одно из собственных значений тензора **E** (например, E_1) больше единицы, другое (E_2) меньше единицы. Если дополнительно к этому единице равно третье собственное значение, то эллипсоид и сфера имеют два общих круговых сечения (рис. 1.1), задаваемых уравнениями

---

[1] За исключением плоскости, проходящей через начало O, узлы которой не изменяют своих положений.

$$\mathbf{r}_{\pm} = \left[\left(\pm\sqrt{1-E_2^2}\,\mathbf{e}_1 + \sqrt{E_1^2-1}\,\mathbf{e}_2\right)\Big/\sqrt{E_1^2-E_2^2}\right]\sin\vartheta + \mathbf{e}_3\cos\vartheta,$$

где $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ – собственные векторы тензора $\mathbf{E}$; ϑ – угол, изменяющийся в пределах от 0 до 2π рад.

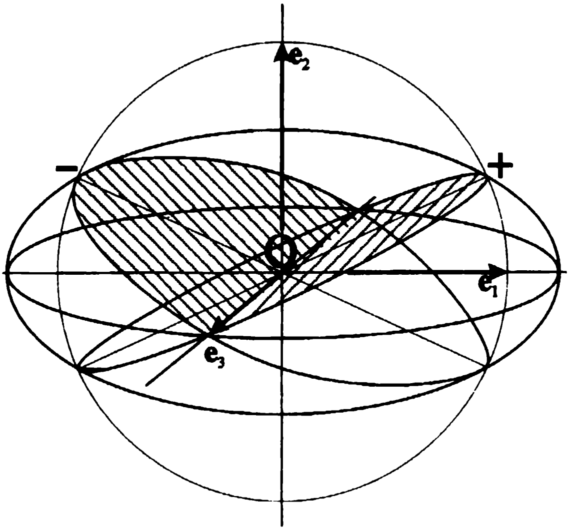

Рис. 1.1. Деформация с инвариантной плоскостью сферического объема кристалла

Это означает, что при выполнении условий

$$E_1 > 1, \quad E_2 < 1, \quad E_3 = 1 \qquad (1.10)$$

существуют плоские сечения сферического объема, задаваемые векторами нормалей $\mathbf{N}_{\pm}$, которые под действием преобразования (1.9) ведут себя как абсолютно жесткие и лишь изменяют ориентацию, занимая положения, задаваемые векторами нормалей $\mathbf{n}_{\pm}$, где

$$\mathbf{n}_{\pm} = [\mathbf{r}_{\pm}, \mathbf{e}_3] \big/ \left|[\mathbf{r}_{\pm}, \mathbf{e}_3]\right| = \left[\sqrt{E_1^2-1}\,\mathbf{e}_1 - (\pm 1)\sqrt{1-E_2^2}\,\mathbf{e}_2\right] \Big/ \sqrt{E_1^2-E_2^2}\ ;$$

$$\mathbf{N}_{\pm} = \left[\mathbf{E}^{-1}\mathbf{r}_{\pm}, \mathbf{e}_3\right] \Big/ \left|\left[\mathbf{E}^{-1}\mathbf{r}_{\pm}, \mathbf{e}_3\right]\right| = \mathbf{E}\mathbf{n}_{\pm} / |\mathbf{E}\mathbf{n}_{\pm}| =$$

$$= \left[E_1\sqrt{E_1^2-1}\,\mathbf{e}_1 - (\pm 1)E_2\sqrt{1-E_2^2}\,\mathbf{e}_2\right] \Big/ \sqrt{(E_1^2-E_2^2)(E_1^2+E_2^2-1)}\,.$$

Ориентацию любого из них можно восстановить, дополнив деформацию (1.9) ортогональным преобразованием $\mathbf{\Omega}_+$ или $\mathbf{\Omega}_-$, где

$$\mathbf{\Omega}_\pm = (\mathbf{n}_\pm, \mathbf{N}_\pm)(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2) \pm |[\mathbf{n}_\pm, \mathbf{N}_\pm]| \, (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) + \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3 ,$$

что приводит к деформационному преобразованию $\mathbf{r} = \mathbf{L}_\pm \mathbf{X}$, где $\mathbf{L}_\pm = \mathbf{\Omega}_\pm \mathbf{E}$, рассматриваемого сферического объема, сохраняющему положение и форму плоского кругового сечения с нормалью $\mathbf{N}_\pm$, т. е. к деформации с инвариантной плоскостью. Очевидно, что ортогональное преобразование не требуется, если не одно, а два собственных значения тензора $\mathbf{E}$ равны единице. В этом случае собственно деформация (1.9) сама по себе является деформацией с инвариантной плоскостью.

Условия (1.10) деформации с инвариантной плоскостью для большинства решеток, испытывающих взаимное превращение, не выполняются, т. е. решетки превращающихся фаз не имеют обычно ни рациональной, ни иррациональной плоскости сопряжения, если судить по параметрам собственно деформации $\mathbf{E}$. С другой стороны, экспериментальные факты свидетельствуют о том, что макроскопическая деформация объема, испытывающего мартенситное превращение, представляет собой однородную деформацию с инвариантной плоскостью, отличную от деформации решетки [1]. Возникающее затруднение устраняется, если макроскопическую деформацию трактовать как составную, включающую в себя деформацию решетки и некоторую дополнительную деформацию, которая изменяет форму превращенной области, не изменяя решетки (деформация при инвариантной решетке). Эта дополнительная деформация может осуществляться путем скольжения или двойникования [2] и в сочетании с деформацией решетки должна давать деформацию с инвариантной плоскостью.

Задача кристаллографических теорий, рассматривающих мартенситное превращение как деформацию с инвариантной плоскостью, состоит, таким образом, в следующем: при заданной собственно деформации решетки найти дополнительную деформацию при инвариантной решетке (сдвиг, двойникование), которая в сочетании с собственно деформацией и вращением приводила бы к деформации с инвариантной плоскостью; вы-

---

[1] Впервые это было установлено Гренингером и Трояно [18] при исследовании рельефа, возникающего на предварительно полированной поверхности образца стали Fe – 22% Ni – 0,8% C в результате $\gamma \rightarrow \alpha$ МП.

[2] Двойникование, строго говоря, не является деформацией при инвариантной решетке, так как сохраняет только тип решетки, изменяя ее ориентировку.

числить параметры последней и установить ориентационное соответствие между решетками превращающихся фаз.

Фундаментальный вклад в создание таких теорий, достаточно полно освещенных в литературе [см., напр., 11], внесли исследования, представленные в работах Векслера, Либермана и Рида [19], Боулза и Маккензи [20]. Все они основываются на использовании условий (1.10), заведомо не позволяющих исключить неопределенность в выборе дополнительной деформации при инвариантной решетке. В результате возникает необходимость разделения элементов деформации на задаваемые и подлежащие определению, которое в упомянутых исследованиях имеет физическое, а не геометрическое (следующее из строения решеток) обоснование, хотя возможности последнего в этом плане не изучены.

Не имеет геометрического обоснования и принимаемый вид дополнительной деформации, его постулируют, обращаясь к экспериментальным фактам [18]. Такое состояние дел в основаниях логической схемы кристаллографических теорий нельзя признать удовлетворительным, так как кристаллографические теории по своей сути – теории геометрические. Учитывая это, вернемся к изучению преобразования (1.1) решетки X в решетку r с геометрической точки зрения, полагая собственно деформацию **E** известной и принимая в качестве базисных объектов ориентационные инварианты преобразования [21].

1.2. Представление ориентационно неизменных плоскостей

Пусть Π_X – некоторая плоскость решетки X. Пусть ориентация плоскости Π_X задается единичным вектором нормали **N**, а положение – радиус-вектором **X** какого-либо узла плоскости Π_X. После деформации (1.1) узлы плоскости Π_X изменяют свое расположение, образуя плоскость Π_r решетки r. Положение и ориентация плоскости Π_r задаются радиус-вектором **r** узла плоскости Π_r и единичным вектором нормали **n**, которые связаны с **X** и **N** соотношениями $\mathbf{r}=\mathbf{LX}$, $\mathbf{n}=\mathbf{L}^{*-1}\mathbf{N}/|\mathbf{L}^{*-1}\mathbf{N}|$ или

$$\mathbf{n}=\mathbf{L}^{*-1}\mathbf{N}/|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}|, \qquad (1.11)$$

если учесть, что $|\mathbf{L}^{*-1}\mathbf{N}|=|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}|$.

Плоскость решетки X будем называть ориентационно-неизменной плоскостью (ОНП) относительно деформации (1.1), если ее ориентация при этой деформации не испытывает изменений. Вектор нормали **N** к ОНП удовлетворяет уравнению

$$\mathbf{N} = \mathbf{L}^{*-1}\mathbf{N} / \left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}\right|, \tag{1.12}$$

следующему из (1.11). Уравнение (1.12), переписанное в виде $\mathbf{L}^{*}\mathbf{N} = \left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}\right|^{-1}\mathbf{N}$, говорит о том, что вектор нормали **N** к ОНП представляет собой собственный вектор тензора $\mathbf{L}^{*}$, соответствующий собственному значению $\left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}\right|^{-1}$, и является, следовательно, характеристическим для тензора $\mathbf{L}^{*}$ объектом.

Собственные значения и собственные векторы тензоров $\mathbf{L}^{*}$ и **L** связаны между собой. Установим эту связь, полагая, что собственные значения L_1^{*}, L_2^{*}, L_3^{*} тензора $\mathbf{L}^{*}$ невырождены. Тензор $\mathbf{L}^{*}$ в этом случае имеет три собственных вектора $\mathbf{N}_1$, $\mathbf{N}_2$, $\mathbf{N}_3$ (существуют три семейства непараллельных ОНП) и может быть представлен в виде

$$\mathbf{L}^{*} = \sum_{i=1}^{3} L_i^{*}\,\mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}^i, \tag{1.13}$$

где $L_i^{*} = \left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}_i\right|^{-1}$; $\mathbf{N}^i = \dfrac{1}{2V_0}\sum_{k,m=1}^{3}\delta_{ikm}[\mathbf{N}_k, \mathbf{N}_m]$, причем $V_0 = (\mathbf{N}_1, [\mathbf{N}_2, \mathbf{N}_3])$, δ_{ikm} – символ Леви-Чивиты. Формула (1.13) позволяет перейти к формуле, определяющей тензор **L**:

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{3} L_i^{*}\,\mathbf{N}^i \cdot \mathbf{N}_i,$$

или к формуле

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{3} L_i\,\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{l}^i, \tag{1.14}$$

где

$$L_i = L_i^{*} = \left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}_i\right|^{-1}, \qquad i = 1, 2, 3, \tag{1.15}$$

суть собственные значения, а

$$\mathbf{l}_i = \mathbf{N}^i / \left|\mathbf{N}^i\right|, \qquad i = 1, 2, 3, \tag{1.16}$$

суть собственные векторы тензора **L**, $\mathbf{l}^i = \left|\mathbf{N}^i\right|\mathbf{N}_i$.

Формулы (1.15) и (1.16) выражают собственные значения и собственные векторы тензора **L** через нормали к ОНП. Обстоятельство это весьма существенно, так как позволяет сделать важные выводы относительно собственных значений тензора **L**, а именно указать пределы изменения собственных значений и предложить геометрически наглядную интерпретацию этих собственных значений.

Действительно, величина $|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}|$, рассматриваемая при заданном **E** как функция орта **N**, ограничена снизу и сверху[1]: $E_1^{-1} \le |\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}| \le E_3^{-1}$, где через E_3 и E_1 обозначены наименьшее и наибольшее собственные значения тензора **E**. С обеих сторон ограничена и обратная ей величина: $E_3 \le |\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}|^{-1} \le E_1$, поэтому собственные значения тензора **L** (см. формулы (1.15)) удовлетворяют неравенствам

$$E_3 \le L_1,\ L_2,\ L_3 \le E_1. \tag{1.17}$$

Далее отметим, что деформационное преобразование решетки X в решетку r заключается в параллельном перемещении ориентационно-неизменных плоскостей каждого семейства и в деформации самих плоскостей. Количественно эти вклады в деформацию можно охарактеризовать отношениями

$$h_i / H_i,\ \sigma_i / \Sigma_i, \tag{1.18}$$

где h_i и H_i – кратчайшие расстояния между двумя ОНП с нормалью $\mathbf{N}_i$, а σ_i и Σ_i – площади параллелограммов в любой из них до и после деформации (1.1) соответственно.

---

[1] Условие экстремума функции $|\mathrm{T}\,\mathbf{N}| = \sqrt{(\mathrm{T}\mathbf{N}, \mathrm{T}\mathbf{N})} = \sqrt{(\mathbf{N}, \mathrm{T}^2\mathbf{N})}$, где T – симметричный тензор, предполагает исчезновение первой вариации $\delta|\mathbf{TN}| \sim (\mathbf{T}^2\mathbf{N}, \delta\mathbf{N}) = (\delta\varphi, [\mathbf{N}, \mathbf{T}^2\mathbf{N}])$, соответствующей вариации $\delta\mathbf{N} = [\delta\varphi, \mathbf{N}]$ орта **N**, где $\delta\varphi$ –вектор бесконечно малого поворота, что имеет место при произвольном $\delta\varphi$, если **N** – собственный вектор тензора **T**. Поэтому справедливы неравенства $T_3 \le |\mathrm{T}\,\mathbf{N}| \le T_1$, где T_3 и T_1 – наименьшее и наибольшее собственные значения тензора **T**. Наглядным подтверждением тому может служить картина деформационного преобразования **n** = **TN** сферы единичного радиуса, в результате которого получается эллипсоид с полуосями, равными собственным значениям тензора **T**.

Нетрудно показать, что

$$h_i / H_i = \left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}_i\right|^{-1}, \quad \sigma_i / \Sigma_i = \left|\mathbf{E}\right|\left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}_i\right|, \tag{1.19}$$

где $\left|\mathbf{E}\right| \equiv \det\mathbf{E}$.

Согласно (1.19) отношения (1.18) зависят, как и следовало ожидать, только от $\mathbf{N}_i$ и собственно деформации **E**. Формулы (1.19) позволяют исключить $\left|\mathbf{E}^{-1}\mathbf{N}_i\right|$ в (1.15), что приводит к выражениям

$$L_i = h_i / H_i, \quad L_i = \left|\mathbf{E}\right|\left(\sigma_i / \Sigma_i\right)^{-1}, \tag{1.20}$$

раскрывающим геометрический смысл собственных значений тензора **L**.

Таким образом, ориентационно неизменные плоскости являются выделенными объектами при описании деформационной перестройки решетки **X** в решетку **r**. Использование их позволяет наглядно представить геометрическую картину деформации и связать ее с характеристическими составляющими тензора **L** – собственными значениями (см. формулы (1.20)) – и инвариантными подпространствами (см. формулы (1.16)) как линиями пересечения ОНП. С другой стороны, формулы (1.13), (1.14) получаются в предположении, что собственные значения тензора $\mathbf{L}^*$ невырождены. В отсутствие вырождения все подпространства, инвариантные относительно преобразования (1.1), одномерны, а инвариантная плоскость – подпространство двухмерное.

1.3. Вырождение собственных значений и размерность инвариантных подпространств

Предположим, что собственные значения тензора $\mathbf{L}^*$ таковы, что [1]

$$L_1 = L_2, \quad L_3 \neq L_1, \tag{1.21}$$

и пусть вырожденному собственному значению соответствует единственная ОНП с нормалью $\mathbf{N}_1$. Тогда будем иметь

$$\mathbf{L}^*\mathbf{N}_1 = L_1\mathbf{N}_1, \quad \mathbf{L}^*\mathbf{N}_3 = L_3\mathbf{N}_3. \tag{1.22}$$

---

[1] Символ «звездочка» (*), отличающий собственные значения тензора $\mathbf{L}^*$ от собственных значений тензора **L**, для сокращения записи опускается, поскольку тензоры $\mathbf{L}^*$ и **L** имеют одинаковые собственные значения.

Задача состоит в том, чтобы выразить тензор $\mathbf{L}^*$ через собственные значения L_1, L_3 и нормали $\mathbf{N}_1$, $\mathbf{N}_3$. Решение ее можно получить, дополнив уравнения (1.22) еще одним уравнением

$$\mathbf{L}^*[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1] = L_1^{-1}\mathbf{E}^2[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1], \tag{1.23}$$

которое следует из закона преобразования

$$\mathbf{L}^{-1}[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1] = [\mathbf{L}^*\mathbf{N}_3, \mathbf{L}^*\mathbf{N}_1]/\det\mathbf{L} = L_3 L_1 [\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]/\det\mathbf{L} \tag{1.24}$$

векторного произведения $[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]$ нормалей $\mathbf{N}_3$, $\mathbf{N}_1$ к ОНП и равенств

$$\mathbf{E}^2\mathbf{L}^{-1} = \mathbf{L}^*, \quad \det\mathbf{L} = \det(\mathbf{L}^*) = L_1^2 L_3.$$

Перепишем уравнения (1.22), (1.23) в виде

$$\mathbf{L}^*\mathbf{v}_i = \mathbf{v}'_i, \qquad i = 1, 2, 3, \tag{1.25}$$

используя обозначения

$$\mathbf{v}_1 \equiv \mathbf{N}_1, \qquad \mathbf{v}_2 \equiv [\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]/|[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]|, \qquad \mathbf{v}_3 \equiv \mathbf{N}_3, \tag{1.26}$$

$$\mathbf{v}'_1 \equiv L_1\mathbf{v}_1, \quad \mathbf{v}'_2 \equiv \mathbf{E}^2\mathbf{v}_2/L_1, \qquad \mathbf{v}'_3 \equiv L_3\mathbf{v}_3, \tag{1.27}$$

и перейдем к уравнению

$$\mathbf{L}^* = \sum_{i=1}^{3}\mathbf{v}'_i \cdot \mathbf{v}^i, \tag{1.28}$$

разрешая (1.25) относительно $\mathbf{L}^*$, где

$$\mathbf{v}^1 = [\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3]/(\mathbf{v}_1, [\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3]) = [\mathbf{N}_3, [\mathbf{N}_1, \mathbf{N}_3]]/|[\mathbf{N}_1, \mathbf{N}_3]|^2; \tag{1.29а}$$

$$\mathbf{v}^2 = [\mathbf{v}_3, \mathbf{v}_1]/(\mathbf{v}_1, [\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3]) = \mathbf{v}_2; \tag{1.29б}$$

$$\mathbf{v}^3 = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]/(\mathbf{v}_1, [\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3]) = [\mathbf{N}_1, [\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]]/|[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]|^2; \tag{1.29в}$$

$$(\mathbf{v}_1, [\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3]) = (\mathbf{v}^1, [\mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3])^{-1} = |[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]|, \quad |\mathbf{v}^1| = |\mathbf{v}^3| = 1/|[\mathbf{N}_3, \mathbf{N}_1]|, \quad |\mathbf{v}^2| = 1.$$

Уравнение (1.28) определяет тензор $\mathbf{L}^*$ через векторы (1.26), (1.27), зависящие, как это и требовалось, от L_1, L_3, $\mathbf{N}_1$, $\mathbf{N}_3$. Через те же векторы будет выражаться и тензор $\mathbf{L}$:

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{3}\mathbf{v}^i \cdot \mathbf{v}'_i,$$

или

$$\mathbf{L} = \mathrm{L}_1 \mathbf{v}^1 \cdot \mathbf{v}_1 + \mathrm{L}_1^{-1} \mathbf{v}^2 \cdot \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2 + \mathrm{L}_3 \mathbf{v}^3 \cdot \mathbf{v}_3 . \qquad (1.30)$$

Что же касается собственных векторов тензора (1.30), то из закона преобразования (1.24), переписанного в виде $\mathbf{L}\mathbf{v}_2 = \mathrm{L}_1 \mathbf{v}_2$, следует, что собственному значению L_1 соответствует собственный вектор

$$\mathbf{l}_1 = \mathbf{v}_2 . \qquad (1.31)$$

Вывод этот согласуется с формулой (1.30), если учесть, что

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}^2 , \quad (\mathbf{v}_2, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2) = (\mathbf{L}\mathbf{v}_2, \mathbf{L}\mathbf{v}_2) = \mathrm{L}_1^2 ,$$

и понятен с геометрической точки зрения, так как непараллельные ОНП выделяют прямую – линию их пересечения, вдоль которой и направлен вектор $\mathbf{l}_1$. Собственный вектор тензора (1.30), соответствующий собственному значению L_3, представляет собой линейную комбинацию $(\mathbf{v}^3, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)\mathbf{v}^2 - \mathrm{L}_1(\mathrm{L}_1 - \mathrm{L}_3)\mathbf{v}^3$ векторов $\mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3$ (в этом легко убедиться путем непосредственной проверки, используя формулу (1.30)) и может быть записан в виде

$$\mathbf{l}_3 = [\mathbf{v}_1, \mathrm{L}_1 \mathrm{L}_3 \mathbf{v}_2 - \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2] / \left| [\mathbf{v}_1, \mathrm{L}_1 \mathrm{L}_3 \mathbf{v}_2 - \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2] \right| . \qquad (1.32)$$

Формула (1.32) связывает $\mathbf{l}_3$ с линией пересечения двух плоскостей, одна из которых – ОНП с нормалью $\mathbf{N}_1 = \mathbf{v}_1$, другая – плоскость с нормалью $(\mathrm{L}_1 \mathrm{L}_3 \mathbf{v}_2 - \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2) / \left| \mathrm{L}_1 \mathrm{L}_3 \mathbf{v}_2 - \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2 \right|$. Сам же тензор $\mathbf{L}$ через собственные векторы (1.31), (1.32) выражается формулой

$$\mathbf{L} = \mathrm{L}_1 \mathbf{l}_1 \cdot \boldsymbol{\lambda}^1 + \mathrm{L}_1^{-1} [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1] \cdot \boldsymbol{\lambda}^2 + \mathrm{L}_3 \mathbf{l}_3 \cdot \boldsymbol{\lambda}^3 ,$$

где

$$\boldsymbol{\lambda}^1 = \mathrm{L}_1^2 \left[\mathbf{E}^{-2} [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1], \mathbf{l}_3 \right] / \left| [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1] \right|^2 ; \quad \boldsymbol{\lambda}^2 = \mathrm{L}_1^2 [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1] / \left| [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1] \right|^2 ;$$

$$\boldsymbol{\lambda}^3 = \mathrm{L}_1^2 \left[\mathbf{l}_1, \mathbf{E}^{-2} [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1] \right] / \left| [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1] \right|^2 ,$$

причем

$$(\boldsymbol{\lambda}^1, \mathbf{l}_1) = 1, \quad (\boldsymbol{\lambda}^2, \mathbf{l}_1) = (\boldsymbol{\lambda}^3, \mathbf{l}_1) = 0, \quad (\boldsymbol{\lambda}^1, \mathbf{l}_3) = (\boldsymbol{\lambda}^2, \mathbf{l}_3) = 0, \ (\boldsymbol{\lambda}^3, \mathbf{l}_3) = 1,$$

$$(\boldsymbol{\lambda}^1, \mathbf{E}^{-2} [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1]) = (\boldsymbol{\lambda}^3, \mathbf{E}^{-2} [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1]) = 0, \ (\boldsymbol{\lambda}^2, \mathbf{E}^{-2} [\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1]) = 1.$$

В этом нетрудно убедиться, учитывая равенства:

$$\mathbf{L}^{*-1}[\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1] = [\mathbf{L}\,\mathbf{l}_3, \mathbf{L}\,\mathbf{l}_1]/\det\mathbf{L} = \mathrm{L}_1^{-1}[\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1],$$

$$\left([\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1], \mathbf{E}^{-2}[\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1]\right) = \left(\mathbf{L}^{*-1}[\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1], \mathbf{L}^{*-1}[\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1]\right) = \mathrm{L}_1^{-2}\left|[\mathbf{l}_3, \mathbf{l}_1]\right|^2.$$

Возвращаясь к обсуждению формул (1.28), (1.30), заметим, что орт $\mathbf{v}_2$ может оказаться собственным вектором тензора **E**, соответствующим какому-либо из собственных значений. Обозначим его для определенности через E_s. В этом случае, следуя (1.23), будем иметь

$$\mathbf{L}^*\mathbf{v}_2 = \mathrm{L}_1^{-1}\mathrm{E}_s^2\,\mathbf{v}_2. \qquad (1.33)$$

Равенство (1.33) говорит о том, что $\mathbf{v}_2$ является нормалью к ОНП, соответствующей собственному значению $\mathrm{L}_1^{-1}\mathrm{E}_s^2$ тензора $\mathbf{L}^*$. Однако по условию (см. формулы (1.21)) тензор $\mathbf{L}^*$ имеет двухкратно вырожденное собственное значение L_1 и невырожденное собственное значение L_3. Условие это не расходится с равенством (1.33), если допустить, что $\mathrm{L}_1^{-1}\mathrm{E}_s^2 = \mathrm{L}_1$, т. е. при $\mathrm{E}_s = \mathrm{L}_1$. Тогда неправомерным становится предположение о единственности собственного вектора $\mathbf{N}_1$, соответствующего собственному значению L_1. Действительно, тензор $\mathbf{L}^*$ при выполнении условий

$$\mathrm{E}_s = \mathrm{L}_1, \quad \mathbf{E}\mathbf{v}_2 = \mathrm{E}_s\,\mathbf{v}_2 \qquad (1.34)$$

приводится к виду

$$\mathbf{L}^* = \mathrm{E}_s\mathbf{I} + \left[\left(|\mathbf{E}|/\mathrm{E}_s^2\right) - \mathrm{E}_s\right]\mathbf{v}_3 \cdot \mathbf{v}^3, \qquad (1.35)$$

следующему из (1.28), (1.34) и равенств:

$$\det\mathbf{L} = \mathrm{L}_1^2\mathrm{L}_3 = |\mathbf{E}|, \quad \sum_{i=1}^{3}\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}^i = \mathbf{I}.$$

Вырожденному собственному значению тензора (1.35) отвечает уже не единственный собственный вектор $\mathbf{N}_1 = \mathbf{v}_1$, а бесконечное множество собственных векторов, так как всякий вектор **N**, образующий прямой угол с вектором $\mathbf{v}^3$, удовлетворяет уравнению $\mathbf{L}^*\mathbf{N} = \mathrm{E}_s\mathbf{N}$ и является поэтому собственным вектором тензора (1.35). Стало быть, вектор $\mathbf{v}^3$ задает направление, выделяющее двухмерное подпространство нормалей к ОНП, инвариантное относительно преобразования, описываемого тензором (1.35).

Аналогичным образом дело обстоит и с тензором

$$\mathbf{L} = E_s\mathbf{I} + \left[\left(|\mathbf{E}|/E_s^2\right) - E_s\right]\mathbf{v}^3 \cdot \mathbf{v}_3 , \tag{1.36}$$

т. е. всякий вектор **l**, принадлежащий ОНП с нормалю $\mathbf{N}_3 = \mathbf{v}_3$, является собственным вектором его, соответствующим двукратно вырожденному собственному значению.

Таким образом, между размерностью подпространства, инвариантного относительно преобразования (1.1) в случае двукратно вырожденного собственного значения тензора **L**, и характеристическими составляющими симметричной части **E** тензора **L** имеется зависимость: инвариантное подпространство двухмерно – плоскость, если выполняются условия, требуемые равенствами (1.34), и одномерно – прямая, в противном случае. Отсюда, в частности, следует, что инвариантное для тензора **L** подпространство, соответствующее вырожденному собственному значению $L_1 = 1$, двухмерно лишь при условии

$$E_s = 1, \qquad \mathbf{E}\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2 , \tag{1.37}$$

и только в этом случае тензор **L** (см. формулу (1.36)) принимает вид $\mathbf{L} = \mathbf{I} + \left(|\mathbf{E}| - 1\right)\mathbf{v}^3 \cdot \mathbf{v}_3$, характерный (см. формулу (1.7)) для деформации с инвариантной плоскостью.

1.4. Преобразование одномерного инвариантного подпространства в двухмерное

Собственные значения L_1, L_2, L_3 тензора $\mathbf{L} = \mathbf{\Omega}\mathbf{E}$ могут варьироваться при заданном **E** в пределах, устанавливаемых неравенствами (1.17), за счет изменения параметров Ψ и $\boldsymbol{\lambda}$ (см. формулу (1.6)) ортогональной составляющей $\mathbf{\Omega}$ при дополнительном ограничении $L_1\, L_2\, L_3 = |\mathbf{E}|$, которое связывает собственные значения между собой, исключая тем самым произвол в выборе одного из них. Легко видеть тогда, что предположение

$$L_1 = L_2 = 1 \tag{1.38а}$$

в отношении двух собственных значений тензора **L** определяет третье:

$$L_3 = |\mathbf{E}| \tag{1.38б}$$

и оправдывается, если

$$E_3 \leq 1 \leq E_1, \; E_3 \leq |\mathbf{E}| \leq E_1 \text{ или } E_1^{-1} \leq E_2 \leq E_3^{-1}, \tag{1.39}$$

где E_3 и E_1 – наименьшее и наибольшее собственные значения тензора **E**.

Выделенность собственных значений (1.38) с геометрической точки зрения объясняется тем, что в этом случае преобразование (1.1) наряду с ориентационными инвариантами, т. е. ориентационно неизменными плоскостями $\{\Pi_1\}$ с нормалями $\mathbf{N}_1 = \mathbf{v}_1$, $\{\Pi_3\}$, с нормалями $\mathbf{N}_3 = \mathbf{v}_3$ и направлением $\mathbf{l}_1 = \mathbf{v}_2$ линий $\{\Gamma_{31}\}$ их пересечения, допускает существование скалярных инвариантов – расстояния между плоскостями $\{\Pi_1\}$, так как $L_1 = h_1 / H_1 = 1$, площади в плоскостях $\{\Pi_3\}$, так как $L_3 = |\mathbf{E}|(\sigma_3 / \Sigma_3)^{-1} = |\mathbf{E}|$, и расстояний в плоскостях $\{\Pi_3\}$ в направлении $\mathbf{l}_1$, так как $\mathbf{L}\,\mathbf{l}_1 = \mathbf{l}_1$. Сочетание указанных инвариантов представляется необходимым для реализации структурной перестройки решеток посредством деформации с инвариантной плоскостью.

Условия (1.39) выполняются для решеток γ и α, испытывающих взаимное превращение. В этом и других случаях, когда собственные значения тензора **E** не расходятся с условиями (1.39), можно положить всегда, что $L_1 = L_2 = 1$, $L_3 = |\mathbf{E}|$, и задать тензор **L** (см. формулу (1.30)) в виде

$$\mathbf{L} = \mathbf{v}^1 \cdot \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}^2 \cdot \mathbf{E}^2\, \mathbf{v}_2 + |\mathbf{E}|\mathbf{v}^3 \cdot \mathbf{v}_3. \tag{1.40}$$

Иначе обстоит дело с условием (1.37), которое, как уже говорилось выше, для большинства решеток (включая решетки γ и α) не выполняется, так что двукратно вырожденному собственному значению тензора (1.40) соответствует одномерное инвариантное подпространство, а для существования инвариантной плоскости требуется двухмерное. Требованию этому можно удовлетворить, если деформационное преобразование (1.1) с тензором (1.40) дополнить еще одним однородным деформационным преобразованием, которое изменило бы размерность инвариантного подпространства, соответствующего вырожденному собственному значению.

1.5. Вспомогательные решетки ξ^2, ξ^3, ρ^3

Вид дополнительной деформации удобно искать, исходя из представлений о решетке, связанной непосредственно с ориентационными инвариантами деформационного преобразования решетки X в решетку г. Для построения такой решетки воспользуемся тройкой некомпланарных векторов:

$$\xi_1 = \xi_{11}\mathbf{v}^1 + \xi_{12}\mathbf{v}^2, \qquad \xi_2 = \xi_{22}\mathbf{v}^2, \tag{1.41а}$$

$$\xi_3 = \xi_{31}\mathbf{v}^1 + \xi_{32}\mathbf{v}^2 + \xi_{33}\mathbf{v}^3, \tag{1.41б}$$

координаты

$$\xi_{ki} = (\xi_k, v_i), \quad k, i = 1, 2, 3, \tag{1.42}$$

которых относительно базиса v^1, v^2, v^3 (см. формулы (1.29)) рассматриваются как свободные параметры. Предполагается, что ξ_{11}, ξ_{22}, ξ_{33} принимают любые отличные от нуля значения, а областями изменения ξ_{12}, ξ_{31}, ξ_{32} служат интервалы:

$$-|\xi_{22}|/2 \le \xi_{12} \le |\xi_{22}|/2, \tag{1.43а}$$

$$(v_1, v_3)\xi_{33} - (|\xi_{11}|/2) \le \xi_{31} \le (v_1, v_3)\xi_{33} + (|\xi_{11}|/2), \tag{1.43б}$$

$$\frac{\xi_{12}}{\xi_{11}}(\xi_{31} - (v_1, v_3)\xi_{33}) - \frac{|\xi_{22}|}{2} \le \xi_{32} \le \frac{\xi_{12}}{\xi_{11}}(\xi_{31} - (v_1, v_3)\xi_{33}) + \frac{|\xi_{22}|}{2}. \tag{1.43в}$$

Такие ограничения на выбор значений ξ_{12}, ξ_{31}, ξ_{32} оправдываются следующими соображениями.

Рассмотрим множество точек, задаваемых радиус-векторами:

$$\xi = \xi_1 + n\xi_2, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots . \tag{1.44}$$

Точки эти образуют одномерную решетку с периодом $|\xi_2|$ на прямой, проходящей через точку ξ_1 параллельно вектору ξ_2. Выразим радиус-векторы (1.44) в виде разложения

$$\xi = \xi_{11}v^1 + [n + (\xi_{12}/\xi_{22})]\,\xi_2 \tag{1.45}$$

по векторам v^1, ξ_2, используя формулы (1.41а).

Пусть выбранное значение ξ_{12} не принадлежит интервалу (1.43а), т. е. $|\xi_{12}/\xi_{22}| > 1/2$. Ничто не мешает тогда представить ξ_{12}/ξ_{22} в виде суммы m + (ξ'_{12}/ξ_{22}) двух слагаемых, одно из которых целое число, а второе удовлетворяет неравенству $|\xi'_{12}/\xi_{22}| \le 1/2$, и перейти от формулы (1.45) к формуле

$$\xi = \xi'_1 + (m + n)\xi_2, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \tag{1.46}$$

где

$$\xi'_1 = \xi_{11}v^1 + \xi'_{12}v^2. \tag{1.47}$$

Радиус-векторы (1.46) определяют то же множество точек, что и радиус-векторы (1.44), но выражаются уже через вектор (1.47), координата ξ'_{12} которого принимает значения из интервала (1.43а).

Рассмотрим теперь множество точек, задаваемых радиус-векторами

$$\xi = \xi_3 + n_1\xi_1 + n_2\xi_2, \quad n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots . \tag{1.48}$$

Точки эти располагаются в плоскости, параллельной плоскости векторов (1.41а), образуя двухмерную решетку с периодами $|\boldsymbol{\xi}_1|$ и $|\boldsymbol{\xi}_2|$ в направлениях $\boldsymbol{\xi}_1 / |\boldsymbol{\xi}_1|$ и $\boldsymbol{\xi}_2 / |\boldsymbol{\xi}_2|$ соответственно.

Представим вектор $\boldsymbol{\xi}_3$ в виде

$$\boldsymbol{\xi}_3 = (\boldsymbol{\xi}_3, \mathbf{v}_3)\mathbf{v}_3 + [\mathbf{v}_3, [\boldsymbol{\xi}_3, \mathbf{v}_3]]\,. \tag{1.49}$$

Первое слагаемое в (1.49) – вектор, ортогональный плоскости векторов (1.41а). Второе слагаемое – вектор, лежащий в плоскости векторов (1.41а). Учитывая это, можно записать

$$[\mathbf{v}_3, [\boldsymbol{\xi}_3, \mathbf{v}_3]] = \xi_3^1 \boldsymbol{\xi}_1 + \xi_3^2 \boldsymbol{\xi}_2\,. \tag{1.50}$$

Формулы (1.49), (1.50) позволяют выразить радиус-векторы (1.48) в виде

$$\boldsymbol{\xi} = (\boldsymbol{\xi}_3, \mathbf{v}_3)\mathbf{v}_3 + (n_1 + \xi_3^1)\boldsymbol{\xi}_1 + (n_2 + \xi_3^2)\boldsymbol{\xi}_2\,. \tag{1.51}$$

Правая часть в (1.51) не изменится, если ее дополнить равным нулю слагаемым $(m_1 - m_1)\boldsymbol{\xi}_1 + (m_2 - m_2)\boldsymbol{\xi}_2$, поэтому радиус-векторы

$$\boldsymbol{\xi} = (\boldsymbol{\xi}_3, \mathbf{v}_3)\mathbf{v}_3 + (m_1 + \xi_3^1)\boldsymbol{\xi}_1 + (m_2 + \xi_3^2)\boldsymbol{\xi}_2 + (n_1 - m_1)\boldsymbol{\xi}_1 + (n_2 - m_2)\boldsymbol{\xi}_2\,,$$

$$n_1, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

определяют то же множество точек, что и радиус-векторы (1.48). Ясно, что при любых отличных от нуля ξ_3^1 и ξ_3^2 всегда найдутся целочисленные m_1 и m_2, такие что $|m_1 + \xi_3^1| \le 1/2$, $|m_2 + \xi_3^2| \le 1/2$. Неравенства эти будут удовлетворяться и при $m_1 = m_2 = 0$, если вектор $\boldsymbol{\xi}_3$ представить в виде линейной комбинации

$$\boldsymbol{\xi}_3 = \xi_3^1\boldsymbol{\xi}_1 + \xi_3^2\boldsymbol{\xi}_2 + \xi_3^3\mathbf{v}_3\,,$$

коэффициенты которой подчиняются требованиям

$$|\xi_3^1| \le 1/2\,, \quad |\xi_3^2| \le 1/2, \quad 0 < |\xi_3^3| < +\infty\,. \tag{1.52}$$

С другой стороны, ξ_3^1, ξ_3^2, ξ_3^3 связаны с координатами (1.42) формулами:

$$\xi_3^1 = [\xi_{31} - (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3)\,\xi_{33}] / \xi_{11}\,, \tag{1.53а}$$

$$\xi_3^2 = \{\xi_{32} - (\xi_{12}/\xi_{11})[\xi_{31} - (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3)\,\xi_{33}]\} / \xi_{22}\,, \tag{1.53б}$$

$$\xi_3^3 = \xi_{33}\,, \tag{1.53в}$$

поэтому неравенства (1.52) будут удовлетворяться при $m_1 = m_2 = 0$, если значения ξ_{12}, ξ_{31}, ξ_{32} выбираются из интервалов (1.43).

Векторы (1.41а) принадлежат ориентационно неизменной плоскости Π_3, проходящей через начало O, и позволяют задать в плоскости Π_3 множество точек, образующих двухмерную решетку. Обозначим эту решетку ξ^2 (рис. 1.2). Перенос решетки ξ^2 на векторы, кратные $\boldsymbol{\xi}_3$, порождает трехмерную решетку ξ^3, периоды которой в направлениях $\xi_1/|\xi_1|$, $\xi_2/|\xi_2|$, $\xi_3/|\xi_3|$ соответственно равны $|\xi_1|$, $|\xi_2|$, $|\xi_3|$ и зависят от значений параметров (1.42).

Векторы (1.41) решетки ξ^3 при деформации, характеризуемой тензором $\mathbf{L}$ (1.40), преобразуются по закону

$$\mathbf{L}\,\xi_i = \rho_i\,, \qquad i = 1, 2, 3, \tag{1.54}$$

где

$$\rho_1 = \xi_1 + (\xi_{11}/\xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2)\,\xi_2\,; \tag{1.55а}$$

$$\rho_2 = \xi_2\,; \tag{1.55б}$$

$$\rho_3 = \xi_{31}\mathbf{v}^1 + (\xi_3\,, \mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2)\,\mathbf{v}^2 + \xi_{33}\,|\mathbf{E}|\,\mathbf{v}^3 =$$

$$= (1 - |\mathbf{E}|)[\xi_3^1 + (\xi_3^3/\xi_{11})(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3)]\xi_1 + \{(\xi_{11}/\xi_{22})[\xi_3^1(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2) +$$

$$+ (\xi_3^3/\xi_{11})(\mathbf{v}_3, \mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2)] + (|\mathbf{E}| - 1)[(\xi_3^3/\xi_{11})(\xi_{12}/\xi_{22})(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3) -$$

$$- \xi_3^2]\}\,\xi_2 + |\mathbf{E}|\,\xi_3\,. \tag{1.55в}$$

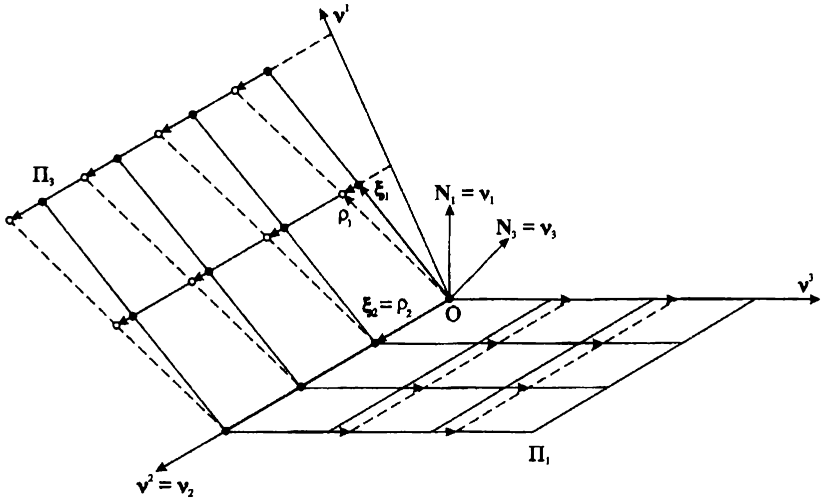

Рис. 1.2. Решетка ξ^2:
• – узлы решетки, построенной на векторах ξ_1, ξ_2;
○ – узлы решетки, построенной
на векторах $\rho_1 = \mathbf{L}\,\xi_1$, $\rho_2 = \mathbf{L}\,\xi_2$

Векторы (1.55) можно рассматривать как базисные векторы трехмерной решетки ρ^3 и трактовать (1.54) как деформацию решетки ξ^3 в решетку ρ^3. Тензор **L**, соответствующий такой трактовке, выражается формулой

$$L = \sum_{i=1}^{3} \rho_i \cdot \xi^i . \qquad (1.56)$$

Здесь

$$\xi^1 = [\xi_2, \xi_3] / V ; \quad \xi^2 = [\xi_3, \xi_1] / V ; \quad \xi^3 = [\xi_1, \xi_2] / V , \qquad (1.57а)$$

где

$$V = (\xi_1, [\xi_2, \xi_3]) = \xi_{11}\, \xi_{22}\, \xi_{33}\, (\mathbf{v}^1, [\mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3]) ,$$

или, в явном виде,

$$\xi^1 = [\mathbf{v}_1 - (\xi_{31} / \xi_{33})\, \mathbf{v}_3] / \xi_{11} ; \qquad (1.57б)$$

$$\xi^2 = \{-(\xi_{12} / \xi_{11})\, \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 + [(\xi_{12} / \xi_{11})(\xi_{31} / \xi_{33}) -$$

$$-(\xi_{32} / \xi_{33})\,]\, \mathbf{v}_3\} / \xi_{22} ; \qquad (1.57в)$$

$$\xi^3 = \mathbf{v}_3 / \xi_{33} . \qquad (1.57г)$$

Деформация (1.54) преобразует двухмерную решетку ξ^2, построенную на векторах ξ_1, ξ_2 в плоскости Π_3, в двухмерную решетку ρ^2, построенную на векторах ρ_1, ρ_2 в той же плоскости Π_3 (см. рис. 1.2). Преобразование это заключается в сдвиге узлов решетки ξ^2 в направлении, которое задается вектором ξ_2 решетки ξ^2, и допускает, следовательно, возможность совмещения преобразованной ρ^2 решетки с преобразуемой ξ^2 решеткой в плоскости Π_3. Последнее имеет место при условии

$$\rho_1 - \xi_1 = k\, \xi_2 , \qquad (1.58)$$

где k – отличное от нуля целое число.

Условие (1.58) предполагает справедливость равенства

$$(\xi_{11} / \xi_{22}) / (\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2) = k , \qquad (1.59)$$

которое всегда выполнимо, поскольку параметры ξ_{11}, ξ_{22} могут принимать любые отличные от нуля значения. Учитывая это, под решеткой ξ^2 условимся подразумевать в дальнейшем решетку, параметры ξ_{11}, ξ_{22} которой заведомо удовлетворяют равенству (1.59). Тогда базисные векторы решеток ξ^3 и ρ^3 будут определяться формулами:

$$\xi_1 = \xi_{22}\, \{[\, k / (\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)]\, \mathbf{v}^1 + (\xi_{12} / \xi_{22})\, \mathbf{v}^2 \}, \qquad \xi_2 = \xi_{22}\, \mathbf{v}^2, \qquad (1.60а)$$

$$\xi_3 = \xi_{31}\mathbf{v}^1 + \xi_{32}\mathbf{v}^2 + \xi_{33}\mathbf{v}^3 = \xi_3^1 \xi_1 + \xi_3^2 \xi_2 + \xi_3^3 \mathbf{v}_3 , \qquad (1.60б)$$

$$\rho_1 = \xi_1 + k\, \xi_2 , \qquad \rho_2 = \xi_2 , \qquad (1.61а)$$

$$\rho_3 = \xi_{31}\mathbf{v}^1 + (\xi_3\,,\mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2)\,\mathbf{v}^2 + \xi_{33}\,|\mathbf{E}|\,\mathbf{v}^3 = \sum_{i=1}^{3}\rho_3^{\,i}\cdot\xi_i\,, \tag{1.61б}$$

$$0 < |\xi_{22}|,\,|\xi_{33}|,\,|\xi_3^3| < +\infty\,, \tag{1.62а}$$

$$0 \le |\xi_{12}\,/\,\xi_{22}|,\,|\xi_3^1|,\,|\xi_3^2| \le 1/2\,, \tag{1.62б}$$

где

$$\rho_3^1 = [(1-|\mathbf{E}|)/k][k\xi_3^1 + (\xi_3^3/\xi_{22})(\mathbf{v}^1,\,\mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2)(\mathbf{v}_1,\,\mathbf{v}_3)]\,;$$

$$\rho_3^2 = k\xi_3^1 + (\xi_3^3/\xi_{22})(\mathbf{v}_3,\,\mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2) + [(1-|\mathbf{E}|)/k][k\xi_3^2 -$$

$$-\,(\xi_{12}\,/\,\xi_{22})(\xi_3^3/\xi_{22})(\mathbf{v}^1,\,\mathbf{E}^2\,\mathbf{v}_2)(\mathbf{v}_1,\,\mathbf{v}_3)]\,;$$

$$\rho_3^3 = |\mathbf{E}|\,,$$

а области допустимых значений параметров ξ_{31}, ξ_{32} определяются неравенствами (1.43б), (1.43в); связь между параметрами ξ_3^i, ξ_{3i}, $i = 1, 2, 3$, устанавливается формулами (1.53).

Подстановка (1.61) в (1.56) приводит к формуле

$$\mathbf{L} = \mathbf{I} + k\xi_2\cdot\xi^1 + \mathbf{u}_3\cdot\xi^3\,,$$

непосредственно учитывающей условие (1.58) совмещения решеток ρ^2 и ξ^2, связанных деформационным преобразованием (1.54), где $\mathbf{u}_3 = \rho_3 - \xi_3$ есть вектор смещения.

1.6. Дополнительная деформация

Деформация (1.54), сдвигая узлы решетки ξ^2 в направлении $\xi_2/|\xi_2|$ на векторы решетки ξ^2, преобразует решетку ξ^2 саму в себя. Преобразованную таким образом решетку можно вновь совместить с решеткой ξ^2, если деформацию (1.54) дополнить деформацией $\mathbf{D}$, компенсирующей сдвиг в направлении $\xi_2/|\xi_2|$, т. е. деформацией, определяемой уравнениями:

$$\mathbf{D}\mathbf{L}\,\xi_i = \rho'_i\,, \quad i = 1, 2, 3, \tag{1.63}$$

где

$$\rho'_1 = \xi_1\,, \quad \rho'_2 = \xi_2\,. \tag{1.64}$$

Тогда решетка ξ^2 будет инвариантной решеткой относительно деформации (1.63) в том смысле, что узлы ее при деформации (1.63) не изменяют своих положений.

Тензор $\mathbf{DL}$, удовлетворяющий уравнениям (1.63), имеет вид

$$\mathbf{DL} = \sum_{i=1}^{3} \rho'_i \cdot \xi^i , \tag{1.65}$$

где векторы ξ^i определяются формулами (1.57).

Формулу (1.65) можно упростить, исключая ρ'_1, ρ'_2 с помощью (1.64) и учитывая тождество $\sum_{i=1}^{3} \xi_i \cdot \xi^i \equiv \mathbf{I}$, что дает

$$\mathbf{DL} = \mathbf{I} + \mathbf{d} \cdot \nu_3 , \tag{1.66}$$

где $\mathbf{d} = (\rho'_3 - \xi_3) / \xi_{33}$.

Разрешая теперь уравнение (1.66) относительно $\mathbf{D}$ и учитывая, что

$$\mathbf{d} \cdot \nu_3 \, \mathbf{L}^{-1} = \mathbf{d} \cdot \mathbf{L}^{*-1} \nu_3 = L_3^{-1} \, \mathbf{d} \cdot \nu_3 = |\mathbf{E}|^{-1} \, \mathbf{d} \cdot \nu_3 ,$$

$$\mathbf{L}^{-1} = \mathbf{I} - (\nu^1, \mathbf{E}^2 \nu_2)\, \nu^2 \cdot \nu_1 + [(|\mathbf{E}|^{-1} - 1)\, \nu^3 - |\mathbf{E}|^{-1}(\nu^3, \mathbf{E}^2 \nu_2)\, \nu^2] \cdot \nu_3 ,$$

найдем

$$\mathbf{D} = \mathbf{L}^{-1} + |\mathbf{E}|^{-1} \, \mathbf{d} \cdot \nu_3$$

или

$$\mathbf{D} = \mathbf{I} - (\nu^1, \mathbf{E}^2 \nu_2)\, \nu^2 \cdot \nu_1 + |\mathbf{E}|^{-1}[\mathbf{d} - (|\mathbf{E}| - 1)\, \nu^3 - (\nu^3, \mathbf{E}^2 \nu_2)\, \nu^2] \cdot \nu_3 .$$

Итак, дополнительная деформация $\mathbf{D}$, восстанавливающая после деформации (1.54) исходное расположение узлов решетки ξ^2 в плоскости Π_3, определяется формулой

$$\mathbf{D} = \mathbf{I} + \mathbf{d}_1 \cdot \nu_1 + \mathbf{d}_3 \cdot \nu_3 , \tag{1.67}$$

где вектор

$$\mathbf{d}_1 = -(\nu^1, \mathbf{E}^2 \nu_2)\, \nu^2 \tag{1.68а}$$

выражается только через составляющие тензора $\mathbf{L}$ (1.40), а вектор

$$\mathbf{d}_3 = |\mathbf{E}|^{-1}[\mathbf{d} - (|\mathbf{E}| - 1)\, \nu^3 - (\nu^3, \mathbf{E}^2 \nu_2)\, \nu^2] \tag{1.68б}$$

зависит еще от произвольно выбираемого вектора $\mathbf{d}$.

Если узлы решетки ξ^2, построенной в плоскости Π_3 на векторах (1.60а), совпадают с узлами решетки X, то деформация $\mathbf{D}$ (1.67) преобразует плоскость Π_3 в инвариантную плоскость, превращая инвариантное для тензора $\mathbf{L}$ (1.40) подпространство, соответствующее двухкратно вырожденному собственному значению $L_1 = 1$, из одномерного в двухмерное.

Что же касается трехмерной решетки ρ^3, построенной на векторах (1.61), то самосовмещение ее при дополнительной деформации реализуется, если

$$\det \mathbf{D} = 1, \tag{1.69а}$$

и

$$\mathbf{u}'_3 \equiv \rho'_3 - \rho_3 = \sum_{i=1}^{3} k_3^i \rho_i , \tag{1.69б}$$

где k_3^i – целые числа.

Детерминант тензора $\mathbf{D}$ можно выразить формулой $\det\mathbf{D} = 1 + (\mathbf{d}_3 , \nu_3)$, которая следует из (1.67), и формулой $\det \mathbf{D} = (\rho'_1, [\rho'_2, \rho'_3]) / (\rho_1, [\rho_2, \rho_3])$, которая следует из закона преобразования

$$\rho'_i = \mathbf{D}\rho_i , \quad i = 1, 2, 3, \tag{1.70}$$

решетки ρ^3 при дополнительной деформации. Поэтому условие самосовмещения (1.69а) требует совместности системы уравнений

$$(\mathbf{d}_3 , \nu_3) = 0 , \quad (\rho'_1, [\rho'_2, \rho'_3]) = (\rho_1, [\rho_2, \rho_3]) . \tag{1.71}$$

Система уравнений (1.71) эквивалентна системе уравнений

$$(\mathbf{d} , \nu_3) = |\mathbf{E}| - 1 , \quad (\rho_1, [\rho_2, \mathbf{u}'_3]) = 0 . \tag{1.72}$$

Переход от (1.71) к (1.72) основывается на использовании определения (1.68б) вектора $\mathbf{d}_3$ и равенств $\rho'_1 = \rho_1 - k\,\rho_2$, $\rho'_2 = \rho_2$ (см. (1.64) и (1.61а)), $\rho'_3 = \rho_3 + \mathbf{u}'_3$ (см. (1.69б)), позволяющих выразить ρ'_1, ρ'_2, ρ'_3 через ρ_1, ρ_2, ρ_3.

Первое уравнение системы (1.72) удовлетворяется тождественно, если $\mathbf{d} = \mathbf{s} + (|\mathbf{E}| - 1)\mathbf{v}^3$, где $\mathbf{s}$ – некоторый вектор, лежащий в плоскости Π_3, т. е. вектор вида

$$\mathbf{s} = s_1 \mathbf{v}^1 + s_2 \mathbf{v}^2 . \tag{1.73}$$

Второму уравнению системы (1.72) и условию самосовмещения (1.69б) отвечает вектор

$$\mathbf{u}'_3 = k_3^1 \rho_1 + k_3^2 \rho_2 , \tag{1.74}$$

также лежащий в плоскости Π_3. С другой стороны, вектор $\mathbf{u}'_3$ можно выразить через составляющие (1.68) тензора (1.67), используя (1.69б), (1.70), (1.67), что дает $\mathbf{u}'_3 = (\nu_1 , \rho_3)\mathbf{d}_1 + (\nu_3 , \rho_3)\mathbf{d}_3$, а затем через векторы ρ_1, ρ_2, используя формулы (1.68), (1.59) и формулы:

$$\mathbf{v}^1 = \{\rho_1 - [k + (\xi_{12} / \xi_{22})]\rho_2\} / \xi_{11} , \quad \mathbf{v}^2 = \rho_2 / \xi_{22} ,$$

$$(\mathbf{v}_1, \mathbf{\rho}_3) = \xi_{31}, \quad (\mathbf{v}_3, \mathbf{\rho}_3) = \xi_{33}|\mathbf{E}|,$$

что дает

$$\mathbf{u}'_3 = (s_1 / k)(\xi_{33} / \xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)\mathbf{\rho}_1 + \{(\xi_{33} / \xi_{22})[s_2 - (\mathbf{v}^3, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)] -$$
$$- (\xi_{31} / \xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2) - (s_1 / k)(\xi_{33} / \xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)[k + (\xi_{12} / \xi_{22})]\}\mathbf{\rho}_2, \tag{1.75}$$

где $\xi_{31} = \xi_{11}\xi_3^1 + (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3)\xi_3^3$; $\xi_{33} = \xi_3^3$ (см. формулы (1.53)).

Исключая $\mathbf{u}'_3$ в (1.74) с помощью (1.75) и учитывая линейную независимость векторов $\mathbf{\rho}_1$, $\mathbf{\rho}_2$, получим

$$s_1(\xi_3^3 / \xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2) = k k_3^1, \tag{1.76а}$$

$$k\{(\xi_3^3 / \xi_{22})[s_2 - (\mathbf{v}_3, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)] - k\xi_3^1\} -$$
$$- s_1(\xi_3^3 / \xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)[k + (\xi_{12} / \xi_{22})] = k k_3^2, \tag{1.76б}$$

где k, k_3^1, k_3^2 – целые числа, причем $k \neq 0$.

Уравнения (1.76) устанавливают связь между непрерывно изменяющимися параметрами, которые входят в формулы (1.60), (1.73), определяющие векторы ξ_1, ξ_2, ξ_3, $\mathbf{s}$, и параметрами k, k_3^1, k_3^2 (см. условия самосовмещения (1.58), (1.69б)), принимающими целочисленные значения.

Итак, дополнительная деформация (1.67), составляющие $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_3$ которой определяются формулой (1.68а) и формулой

$$\mathbf{d}_3 = [\mathbf{s} - (\mathbf{v}^3, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)\mathbf{v}^2] / |\mathbf{E}|,$$

а $\mathbf{s}$ – формулой (1.73), будет деформацией при инвариантной решетке ρ^3, если решетка ξ^3, преобразуемая в решетку ρ^3 путем однородной деформации (1.54), задается векторами (1.60) и если параметры векторов (1.60) (1.73) отвечают ограничениям, которые выражаются уравнениями (1.76) и неравенствами (1.62).

Заметим, что в процедурном плане более удобным может оказаться другой подход, который основывается на уравнениях:

$$\mathbf{LD}'\xi_1 = \xi_1, \mathbf{LD}'\xi_2 = \xi_2, \mathbf{LD}'\xi_3 = \mathbf{\rho}_3'', \tag{1.77}$$

выражающих тот факт, что преобразование одномерного инвариантного подпространства в двухмерное можно получить, деформируя решетку ξ^3 в обратной последовательности (когда дополнительная деформация, т. е. деформация $\mathbf{D}'$, выполняется первой). Тензор $\mathbf{D}'$, удовлетворяющий уравнениям (1.77), определяется формулой

$$\mathbf{D}' = \mathbf{I} + \mathbf{d}_1' \cdot \nu_1 + \mathbf{d}_3' \cdot \nu_3, \tag{1.78}$$

где

$$\mathbf{d}_1' = \mathbf{d}_1; \tag{1.79а}$$

$$\mathbf{d}_3' = \mathbf{d}' + (\nu_1, \mathbf{d}')\,\mathbf{d}_1 + |\mathbf{E}|^{-1}[1 + (\nu_3, \mathbf{d}')][(1 - |\mathbf{E}|)\,\nu^3 - (\nu^3, \mathbf{E}^2\nu_2)\nu^2]; \tag{1.79б}$$

$$\mathbf{d}' = (\rho_3'' - \xi_3) / \xi_{33}, \tag{1.79в}$$

а произведение $\mathbf{LD}'$ – формулой

$$\mathbf{LD}' = \mathbf{I} + \mathbf{d}' \cdot \nu_3. \tag{1.80}$$

Различие между первым и вторым подходами заключается в том, что при первом подходе дополнительной деформации подвергается решетка ρ^3, задаваемая векторами (1.61), а при втором – решетка ξ^3, задаваемая векторами (1.41).

Дополнительная деформация $\mathbf{D}'$ преобразует векторы (1.41) решетки ξ^3 в векторы

$$\xi_1' = \mathbf{D}'\xi_1, \qquad \xi_2' = \mathbf{D}'\xi_2, \qquad \xi_3' = \mathbf{D}'\xi_3,$$

где

$$\xi_1' = \xi_1 + \xi_{11}\mathbf{d}_1'; \quad \xi_2' = \xi_2; \quad \xi_3' = \xi_3 + \xi_{31}\mathbf{d}_1' + \xi_{33}\mathbf{d}_3'.$$

Решетка (обозначим ее ξ'^2), построенная на векторах ξ_1', ξ_2' в плоскости Π_3, совмещается с решеткой, построенной на векторах (1.41а), при условии

$$\xi_1' - \xi_1 = k'\xi_2,$$

(k' – отличное от нуля целое число), предполагающем справедливость равенства

$$(\xi_{11} / \xi_{22}) / (\nu^1, \mathbf{E}^2\nu_2) = -k',$$

поэтому под решеткой ξ^2 в данном случае следует подразумевать решетку, построенную на векторах

$$\xi_1 = \xi_{22}\{-[k' / (\nu^1, \mathbf{E}^2\nu_2)]\nu^1 + (\xi_{12} / \xi_{22})\nu^2\}, \qquad \xi_2 = \xi_{22}\nu^2, \tag{1.81}$$

где параметры ξ_{22}, ξ_{12} / ξ_{22} принимают значения из интервалов (1.62).

Векторы (1.81) вместе с вектором ξ_3 (см. формулы (1.60б)) образуют базис решетки ξ^3. Тогда базисом трехмерной решетки ξ'^3 будет тройка векторов:

$$\xi_1' = \xi_1 + k'\xi_2, \quad \xi_2' = \xi_2, \tag{1.82а}$$

$$\xi_3' = \sum_{i=1}^{3} \xi_3'^i \xi_i, \tag{1.82б}$$

где

$$\xi_3'^1 = (\xi^1, \mathbf{d}')\xi_3^3 + [(1-|\mathbf{E}|^{-1})/k'][1 + (\nu_3, \mathbf{d}')][k'\xi_3^1 - \\ - (\xi_3^3/\xi_{22})(\nu^1, \mathbf{E}^2\nu_2)(\nu_1, \nu_3)]; \tag{1.83а}$$

$$\xi_3'^2 = k'\xi_3^1 + (\xi^2, \mathbf{d}')\xi_3^3 - (\xi_3^3/\xi_{22})(\nu^1, \mathbf{E}^2\nu_2)(\nu_1, \nu_3 + \mathbf{d}') - \\ - (\xi_3^3/\xi_{22})|\mathbf{E}|^{-1}[1 + (\nu_3, \mathbf{d}')]\{(\nu^3, \mathbf{E}^2\nu_2) + \\ + [(1-|\mathbf{E}|)/k'][k'(\xi_{22}/\xi_3^3)\xi_3^2 + (\xi_{12}/\xi_{22})(\nu^1, \mathbf{E}^2\nu_2)(\nu_1, \nu_3)]\}; \tag{1.83б}$$

$$\xi_3'^3 = [1 + (\nu_3, \mathbf{d}')]/|\mathbf{E}|; \tag{1.83в}$$

векторы ξ^1, ξ^2 определяются формулами (1.57), а области допустимых значений параметров ξ_3^1, ξ_3^2, ξ_3^3 устанавливаются неравенствами (1.62).

Дополнительная деформация $\mathbf{D}'$ будет деформацией при инвариантной решетке, если решетка ξ'^3, построенная на векторах (1.82), совмещается с решеткой ξ^3, построенной на векторах (1.81). Последнее имеет место при условиях:

$$\det \mathbf{D}' = 1, \tag{1.84а}$$

$$\xi_3' - \xi_3 = \sum_{i=1}^{3} k_3'^i \xi_i, \tag{1.84б}$$

где $k_3'^i$ – целые числа.

Тензор (1.78) отвечает условию (1.84а), если составляющая $\mathbf{d}_1'$ его выражается формулой (1.79а), а вектор (1.79в) и составляющая (1.79б) выбираются в виде:

$$\mathbf{d}' = \mathbf{s}' + (|\mathbf{E}| - 1)\nu^3, \tag{1.85а}$$

$$\mathbf{d}_3' = \mathbf{s}' - [s_1'(\nu^1, \mathbf{E}^2\nu_2) + (\nu^3, \mathbf{E}^2\nu_2)]\nu^2, \tag{1.85б}$$

где

$$\mathbf{s}' = s_1'\nu^1 + s_2'\nu^2 \tag{1.86}$$

есть некоторый вектор, лежащий в плоскости Π_3.

Условие (1.84б) удовлетворяется, если

$$\xi_3' = \xi_3 + k_3'^1 \xi_1 + k_3'^2 \xi_2 \tag{1.87}$$

и если параметры векторов (1.81), (1.60б), (1.86), (1.87) отвечают ограничениям, которые следуют из (1.82б), (1.83), (1.85а), (1.87) и выражаются уравнениями:

$$- s_1'(\xi_3^3 / \xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2) = k' k_3'^1,$$

$$k'\{(\xi_3^3 / \xi_{22})[s_2' - (\mathbf{v}_3, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)] + k'\xi_3^1\} +$$

$$+ s_1'(\xi_3^3 / \xi_{22})(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2)[(\xi_{12} / \xi_{22}) - k'] = k' k_3'^2 .$$

где k', $k_3'^1$, $k_3'^2$ – целые числа, причем $k' \neq 0$.

Подводя итог, отметим, что дополнительная деформация, будь то деформация (1.67) или деформация (1.78), в общем случае (когда $\mathbf{d}_3$ и $\mathbf{d}'_3$ (см. формулы (1.68б) и (1.79б)) отличны от нуля) сдвигом не является и может быть представлена (не единственным образом) как последовательность двух сдвигов, например на векторы $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_3$ или $\mathbf{d}'_1$ и $\mathbf{d}'_3$, в соответствии с разложением тензоров (1.67), (1.78) в произведения

$$\mathbf{D} = (\mathbf{I} + \mathbf{d}_3 \cdot \mathbf{v}_3)(\mathbf{I} + \mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{v}_1) , \quad \mathbf{D}' = (\mathbf{I} + \mathbf{d}'_3 \cdot \mathbf{v}_3)(\mathbf{I} + \mathbf{d}'_1 \cdot \mathbf{v}_1),$$

где $\mathbf{d}_1$, $\mathbf{d}_3$ определяются формулами (1.68), а $\mathbf{d}'_1$, $\mathbf{d}'_3$ – формулами (1.79).

Заключительные замечания

Представляется уместным обратить внимание на два обстоятельства.

Во-первых, сама возможность изменения размерности подпространства, инвариантного для тензора $\mathbf{L}$, зависит только от взаимного расположения узлов в каждой из решеток X и r, так как определяется условиями (1.39), выражающими ограничения[1] только на характеристические составляющие собственно деформации $\mathbf{E}$.

Во-вторых, формулы (1.40), (1.67), (1.78) выражают тензоры $\mathbf{L}$, $\mathbf{D}$, $\mathbf{D}'$ через нормали к ориентационно неизменным плоскостям, соответствующим собственным значениям (1.38), и приобретают поэтому практическое значение, если указан способ, позволяющий установить параметры ортогонального преобразования $\mathbf{\Omega}$, обеспечивающего требуемые собственные значения и ориентационно неизменные плоскости.

---

[1] Напомним также об ограничении $|\mathbf{E}| \neq 1$, которое принимается в настоящей работе.

Глава 2. ПОСТРОЕНИЕ ОРТОГОНАЛЬНОЙ ЧАСТИ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ОРИЕНТАЦИОННО НЕИЗМЕННЫХ ПЛОСКОСТЕЙ

Предлагается процедура построения ортогональной части деформационного преобразования, основанная на использовании ориентационных инвариантов преобразования и решения задачи на собственные значения и собственные векторы тензора **L**.

2.1. Связь собственных значений тензора L с параметрами ортогонального преобразования Ω

При заданном тензоре **L** собственные значения L_1, L_2, L_3 его находятся из решения характеристического уравнения

$$L^3 + J_1 L^2 + J_2 L + J_3 = 0\,, \tag{2.1}$$

коэффициенты которого

$$J_1 = -<\mathbf{L}>,\quad J_2 = <\mathbf{L}^{-1}>\det\mathbf{L} = (<\mathbf{L}>^2 - <\mathbf{L}^2>)\,/\,2,\quad J_3 = -\det\mathbf{L} \tag{2.2}$$

суть базисные инварианты тензора **L**, где $<\ldots> \equiv \mathrm{Sp}(\ldots)$.

Однако в задаче, рассматриваемой здесь, собственные значения тензора **L** предполагаются известными (см. формулы (1.38)), а определению подлежит сам тензор **L**, точнее, его ортогональная составляющая **Ω** (см. формулы (1.2), (1.6)). Поэтому следует обратиться к равенствам:

$$J_1 = -L_1 - L_2 - L_3\,,\quad J_2 = L_1 L_2 + L_2 L_3 + L_3 L_1\,,\quad J_3 = -L_1 L_2 L_3\,, \tag{2.3}$$

$$J_1 = J_{10}\cos\Psi - (1 - \cos\Psi)(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda})\,,$$

$$J_2 = J_{20} + (1 - \cos\Psi)(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{E}(\mathbf{E} + J_{10}\mathbf{I})\,\boldsymbol{\lambda})\,, \tag{2.4а}$$

$$J_3 = J_{30}\,, \tag{2.4б}$$

выражающим базисные инварианты тензора **L** через собственные значения L_1, L_2, L_3 , параметры Ψ, $\boldsymbol{\lambda}$ ортогонального преобразования (1.6) и базисные инварианты $J_{10} = -<\mathbf{E}>$, $J_{20} = (<\mathbf{E}>^2 - <\mathbf{E}^2>)/2$, $J_{30} = -|\mathbf{E}|$ тензора **E**.

Равенства (2.3) устанавливают связь между корнями характеристического уравнения (2.1) и его коэффициентами, а равенства (2.4) получаются из (2.2), если **L** в (2.2) исключить с помощью разложения (1.2) и воспользоваться затем формулой (1.6).

Равенства (2.3) при заданных L_1, L_2, L_3 (см. формулы (1.38)) позволяют выразить базисные инварианты тензора **L** через $|\mathbf{E}|$:

$$J_1 = -2 - |\mathbf{E}|, \quad J_2 = 1 + 2|\mathbf{E}|, \quad J_3 = -|\mathbf{E}|.$$

Равенства (2.4а), дополненные условием нормировки

$$|\boldsymbol{\lambda}| = 1, \tag{2.5}$$

можно рассматривать тогда как уравнения относительно Ψ и $\boldsymbol{\lambda}$.

Представим вектор $\boldsymbol{\lambda}$ в виде разложения

$$\boldsymbol{\lambda} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \mathbf{e}_i \tag{2.6}$$

по собственным векторам тензора **E**, а равенства (2.4а) в виде:

$$1 - \cos\Psi = (J_{10} - J_1) / [J_{10} + (\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda})],$$

$$1 - \cos\Psi = (J_2 - J_{20}) / (\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{E}(\mathbf{E} + J_{10}\mathbf{I})\, \boldsymbol{\lambda}), \tag{2.7}$$

разрешенном относительно $1 - \cos\Psi$. Исключая теперь $1 - \cos\Psi$ в (2.7) и используя (2.6), придем к уравнению

$$\sum_{i=1}^{3} (\lambda_i / a_i)^2 = 1, \tag{2.8}$$

где

$$a_i = \sqrt{J_{10}(J_2 - J_{20})} \Big/ \sqrt{E_i[J_{20} - J_2 + (J_{10} - J_1)(J_{10} + E_i)]}. \tag{2.9}$$

Уравнение (2.8) нетрудно разрешить относительно λ_1, λ_2, λ_3, но при этом необходимо учитывать соотношения между коэффициентами (2.9), которые зависят от соотношений между собственными значениями тензора **E**. Условия (1.39) допускают несколько вариантов таких соотношений, каждое из которых накладывает свои ограничения на коэффициенты (2.9). Рассмотрим их поочередно.

2.2. Параметры ортогонального преобразования при дополнительных ограничениях на детерминант собственно деформации

Параметры ортогонального преобразования выражаются наиболее просто через характеристические составляющие собственно деформации **E**, если преобразуемые решетки допускают существование дополнительных связей между детерминантом тензора **E** и его собственными значениями. Последнее имеет место в перечисленных далее случаях.

Во-первых, при

$$E_3 < E_2 < E_1 = |\mathbf{E}| . \tag{2.10а}$$

Тогда

$$a_1 = 1, \qquad 1 < a_2 < a_3 , \tag{2.10б}$$

и уравнение (2.8) удовлетворяется, если

$$\boldsymbol{\lambda} = \eta \mathbf{e}_1 , \tag{2.11}$$

где $\eta = \pm 1$.

Первое из равенств (2.7) в этом случае дает

$$\cos\Psi = 2 / (E_2 + E_3) = 2 E_3 / (1 + E_3^2) .$$

Во-вторых, при

$$E_3 < E_2 = E_1 = |\mathbf{E}| . \tag{2.12а}$$

Тогда

$$a_3 > 1, \qquad a_1 = a_2 = 1 , \tag{2.12б}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = \cos\varphi\, \mathbf{e}_1 + \sin\varphi\, \mathbf{e}_2 , \qquad 0 \le \varphi < 2\pi , \tag{2.13}$$

$$\cos\Psi = 2 / (|\mathbf{E}| + E_3) = 2 E_3 / (1 + E_3^2) .$$

В-третьих, при

$$E_3 = |\mathbf{E}| < E_2 < E_1 . \tag{2.14а}$$

Тогда

$$a_3 = 1, \qquad a_1 < a_2 < 1 , \tag{2.14б}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = \eta \mathbf{e}_3 , \quad \eta = \pm 1 ,$$

$$\cos\Psi = 2 / (E_1 + E_2) = 2 E_1 / (E_1^2 + 1) .$$

В-четвертых, при

$$E_3 = |\mathbf{E}| = E_2 < E_1 . \tag{2.15а}$$

Тогда

$$a_1 < 1, \qquad a_2 = a_3 = 1 , \tag{2.15б}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = \cos\varphi\, \mathbf{e}_2 + \sin\varphi\, \mathbf{e}_3 , \quad 0 \le \varphi < 2\pi ,$$

$$\cos\Psi = 2 / (E_1 + |\mathbf{E}|) = 2 E_1 / (E_1^2 + 1) .$$

Заметим, что соотношения (2.10а), (2.12а), (2.14а), (2.15а) выражают фактически условия существования метрических инвариантов – площадей и расстояний в плоскостях, представляющих собой ориентационные инварианты для тензора **E**. Это и упрощает зависимость параметров ортогонального преобразования от собственно деформации **E**.

2.3. Связь между параметрами ортогонального преобразования и характеристическими составляющими собственно деформации

Предположим теперь, что собственные значения тензора **E** и коэффициенты (2.9), в свою очередь, подчиняются одному из следующих вариантов соотношений:

$$E_3 < |\mathbf{E}| < E_2 < E_1 \ , \tag{2.16а}$$

$$a_1 < a_2 < 1 \ , \quad a_3 > 1 \ ; \tag{2.16б}$$

$$E_3 < E_2 = |\mathbf{E}| < E_1 \ , \tag{2.17а}$$

$$a_1 < 1 \ , \quad a_2 = 1 \ , \quad a_3 > 1 \ ; \tag{2.17б}$$

$$E_3 < E_2 < |\mathbf{E}| < E_1 \ , \tag{2.18а}$$

$$a_1 < 1 \ , \quad 1 < a_2 < a_3 \ ; \tag{2.18б}$$

$$E_3 < |\mathbf{E}| < E_2 = E_1 \ , \tag{2.19а}$$

$$a_1 = a_2 < 1 \ , \quad a_3 > 1 \ . \tag{2.19б}$$

Уравнению (2.8) можно удовлетворить в этих случаях, полагая $\lambda_1 = a_1 \sin\theta \cos\varphi$, $\lambda_2 = a_2 \sin\theta \sin\varphi$, $\lambda_3 = a_3 \cos\theta$, где θ – азимутальный, а φ – полярный углы. Вектор $\boldsymbol{\lambda}$ будет иметь единичную длину, если

$$(a_1^2 \cos^2\varphi + a_2^2 \sin^2\varphi) \sin^2\theta + a_3^2 \cos^2\theta = 1 \ . \tag{2.20}$$

Разрешая (2.20) относительно $\sin^2\theta$, найдем

$$\sin\theta = \sin\theta_0 \Big/ \sqrt{1 - K\sin^2\varphi} \ ,$$

$$\cos\theta = \eta \cos\theta_0 \sqrt{1 - K'\sin^2\varphi} \Big/ \sqrt{1 - K\sin^2\varphi} \ . \tag{2.21}$$

Здесь $\eta = \pm 1$,

$$\sin\theta_0 = \sqrt{a_3^2 - 1} \Big/ \sqrt{a_3^2 - a_1^2} \ ; \qquad \cos\theta_0 = \sqrt{1 - a_1^2} \Big/ \sqrt{a_3^2 - a_1^2} \ ;$$

$$K = (a_2^2 - a_1^2)/(a_3^2 - a_1^2) \ ; \qquad K' = K/\cos^2\theta_0 \ , \tag{2.22}$$

причем $0 < K < 1$ ($K = 0$, $K' = 0$, если $E_1 = E_2 > |\mathbf{E}|$), $0 < K' \leq 1$, если $E_2 \geq |\mathbf{E}|$; $K' > 1$, если $E_2 < |\mathbf{E}|$.

Формулы (2.21) имеют смысл при любых φ, если $E_2 > |\mathbf{E}|$, и при φ из интервалов:

$$[0, \varphi_0], \qquad [\pi - \varphi_0, \pi + \varphi_0], \qquad [2\pi - \varphi_0, 2\pi), \tag{2.23}$$

если $E_2 < |\mathbf{E}|$, где $\varphi_0 = \arcsin\left(1/\sqrt{K'}\right)$.

Итак, в случаях, выделенных соотношениями (2.16а), (2.17а), (2.18а), (2.19а) вектор $\boldsymbol{\lambda}$, удовлетворяющий уравнению (2.8) и условию нормировки (2.5), является функцией φ и параметра η, принимающего значения (± 1). В явном виде эту функцию можно выразить формулой

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{A}\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\lambda}_0 . \tag{2.24}$$

Здесь

$$\boldsymbol{\lambda}_0 = \boldsymbol{\lambda}|_{\varphi=0} = a_1 \sin\theta_0\, \mathbf{e}_1 + \eta a_3 \cos\theta_0\, \mathbf{e}_3 ;$$

$$\boldsymbol{\omega} = \cos\varphi\,(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2) + \sin\varphi\,(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) + \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3 \tag{2.25}$$

есть поворот на угол φ вокруг оси $\mathbf{e}_3$;

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{3} A_i \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i \tag{2.26}$$

есть симметричный тензор, перестановочный с тензором $\mathbf{E}$;

$$A_1 = 1\Big/\sqrt{1 - K\sin^2\varphi}\ , \quad A_2 = A_1 a_2 / a_1\ , \quad A_3 = A_1\sqrt{1 - K'\sin^2\varphi} \tag{2.27}$$

суть собственные значения тензора $\mathbf{A}$.

Угол φ принимает значения из интервалов (2.23), если $E_2 < |\mathbf{E}|$, а при $E_2 \geq |\mathbf{E}|$ допустимы любые значения φ из интервала $[0, 2\pi)$.

Разрешая теперь первое из равенств (2.7) относительно $\cos\Psi$ и используя (2.24), придем к формуле

$$\cos\Psi = C . \tag{2.28}$$

В формуле (2.28)

$$C = C_0 (1 - C' \sin^2\varphi) / (1 - C'' \sin^2\varphi) \tag{2.29}$$

есть функция φ, значения которой удовлетворяют неравенствам $0 < C < 1$, причем

$$C_0 = (|J_1| - (\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda}_0)) / (|J_{10}| - (\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda}_0)) ; \tag{2.30}$$

$$C' = (K|J_1| - Q) / (|J_1| - (\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda}_0))\ ;$$

$$C'' = (K|J_{10}| - Q) / (|J_{10}| - (\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda}_0))\ , \tag{2.31}$$

где

$$(\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\,\boldsymbol{\lambda}_0) = E_1 a_1^2 \sin^2\theta_0 + E_3 a_3^2 \cos^2\theta_0\ ; \tag{2.32}$$

$$Q = (E_1 a_1^2 - E_2 a_2^2) \sin^2\theta_0 + K E_3 a_3^2\ . \tag{2.33}$$

Производная $\partial C/\partial\varphi = C_0\,(C'' - C')\sin 2\varphi\ /\ (1 - C''\sin^2\varphi)^2$ функции (2.29) по φ исчезает при $\varphi = 0,\ \pi/2,\ \pi,\ 3\pi/2$, причем $\partial^2 C/\partial\varphi^2\,|_{\varphi = 0,\,\pi} = 2C_0\,(C'' - C')$, $\partial^2 C/\partial\varphi^2\,|_{\varphi = \pi/2,\,3\pi/2} = -2C_0\,(C'' - C') / (1 - C'')^2$. Знак разности

$$C'' - C' = \frac{\left(|J_{10}| - |J_1|\right)\Delta}{\left(|J_{10}| - (\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda}_0)\right)\left(|J_1| - (\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\boldsymbol{\lambda}_0)\right)} \tag{2.34}$$

определяется знаком сомножителя $\Delta = Q - K\,(\boldsymbol{\lambda}_0, \mathbf{E}\,\boldsymbol{\lambda}_0)$, так как все остальные сомножители в (2.34) заведомо положительны. Используя (2.33), (2.22), (2.32), (2.9), нетрудно показать, что

$$\Delta = \frac{a_1^2 a_2^2 a_3^2\left(|J_{10}| - |J_1|\right)(E_1 - E_2)(E_2 - E_3)(E_1 - E_3)\sin^2\theta_0}{J_{10}(J_2 - J_{20})(a_3^2 - a_1^2)}$$

и является величиной положительной, поэтому $C'' - C' > 0$. Следовательно, при $\varphi = \pi/2,\ 3\pi/2$ функция (2.29) достигает наибольшего значения:

$$C_{max} = C\,|_{\varphi = \pi/2,\,3\pi/2} = C_0\,(1 - C') / (1 - C'')\ ,$$

а при $\varphi = 0,\ \pi$ – наименьшего:

$$C_{min} = C\,|_{\varphi = 0,\,\pi} = C_0\ .$$

Поэтому

$$C_{min} \le \cos\Psi \le C_{max}\ ,$$

если $E_2 \ge |\mathbf{E}|$, и

$$C_{min} \le \cos\Psi \le C\,|_{\varphi = \varphi_0} = C_0\,(K' - C') / (K' - C'')\ ,$$

если $E_2 < |\mathbf{E}|$, так как в последнем случае φ принимает значения из интервалов (2.23), не содержащих $\varphi = \pi/2,\ 3\pi/2$.

Наконец, пусть собственные значения тензора $\mathbf{E}$ удовлетворяют соотношениям

$$E_3 = E_2 < |\mathbf{E}| < E_1\ .$$

Тогда

$$a_1 < 1, \quad a_2 = a_3 > 1,$$

$$\cos\Psi = C_0 , \tag{2.35}$$

где

$$C_0 = \frac{1}{2E_3(E_1 + E_3)}\left[2E_3(1 + E_1E_3) + \left(1 - E_3^2\right)(1 - E_1E_3)\right] ; \tag{2.36}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = \eta\sqrt{\Lambda'}\mathbf{e}_1 + \sqrt{1 - \Lambda'}(\cos\varphi\,\mathbf{e}_2 + \sin\varphi\,\mathbf{e}_3), \quad \eta = \pm 1 , \ 0 \le \varphi < 2\pi ; \tag{2.37}$$

$$\Lambda' = \frac{(1 - E_3)^2(E_1E_3 - 1)}{2E_3(E_1 - E_3)(1 - C_0)} . \tag{2.38}$$

Формулы (2.24) – (2.31), (2.35) – (2.38) выражают в явном виде зависимость параметров ортогонального преобразования $\boldsymbol{\Omega}$ от характеристических составляющих тензора **E** при условии, что собственные значения тензора **E** не расходятся с требованиями (1.39).

Заметим, что требованиям (1.39) отвечает, в частности, тензор (1.4б), описывающий один из вариантов собственно деформации γ-решетки в α-решетку.

Несколько проще обстоит дело, если собственно деформация одной решетки в другую при взаимном превращении γ- и α-решеток реализуется по схеме Бейна. В этом случае удобно перейти к формулам:

$$\boldsymbol{\lambda} = \sqrt{1 - \Lambda}(\mathbf{e}_1 \cos\varphi + \mathbf{e}_2 \sin\varphi) + \eta\sqrt{\Lambda}\,\mathbf{e}_3 ,$$

$$\cos\Psi = C_0 ,$$

где

$$\Lambda = \frac{(1 - E_1E_3)(E_1 - 1)^2}{2E_1(E_1 - E_3)(1 - C_0)} ;$$

$$C_0 = \frac{1}{2E_1(E_1 + E_3)}\left[2E_1(1 + E_1E_3) - \left(E_1^2 - 1\right)(1 - E_1E_3)\right] . \tag{2.39}$$

В последних двух формулах

$$E_1 = \kappa\sqrt{2} , \quad E_3 = \kappa\tau ,$$

в случае $\gamma \to \alpha$ перестройки, и $E_1 = \dfrac{1}{\kappa\sqrt{2}}$, $E_3 = \dfrac{1}{\kappa\tau}$ в случае $\alpha \to \gamma$ перестройки, где κ и τ определяются в пояснениях к формулам (1.4), (1.5).

Следует, однако, заметить, что C_0 и Λ, рассматриваемые как функции E_1 и E_3 , обладают свойством $C_0\,(E_1^{-1}, E_3^{-1}) = C_0\,(E_1 , E_3)$, $\Lambda\,(E_1^{-1}, E_3^{-1}) = \Lambda\,(E_1 , E_3)$, т. е. не изменяются при замене $E_1 \to E_1^{-1}$, $E_3 \to E_3^{-1}$, поэтому их значения для прямого и обратного превращений решеток γ и α совпадают.

2.4. Построение ориентационно неизменных плоскостей

Нормали к ориентационно неизменным плоскостям можно искать при известных параметрах ортогонального преобразования $\mathbf{\Omega}$ и собственных значениях тензора $\mathbf{L}$, исходя из уравнения

$$(\mathbf{L}^{*} - p\mathbf{I})\mathbf{N} = 0 \ , \tag{2.40}$$

где $\mathbf{L} = \mathbf{\Omega E}$, $p = L_i$, $i = 1, 2, 3$.

Уравнению (2.40) удовлетворяет вектор

$$\mathbf{X}_{kn}(p) = [(\mathbf{L} - p\mathbf{I})\mathbf{e}_k \, , \, (\mathbf{L} - p\mathbf{I})\mathbf{e}_n] \, , \tag{2.41}$$

где $\mathbf{e}_k$, $\mathbf{e}_n$ – собственные векторы тензора $\mathbf{E}$, выбираемые произвольно, но так, чтобы вектор $\mathbf{X}_{kn}$ отличался от нулевого.

Действительно, $(\mathbf{e}_m , (\mathbf{L}^{*} - p\,\mathbf{I})\,\mathbf{X}_{kn}(p)) = ((\mathbf{L} - p\,\mathbf{I})\mathbf{e}_m , \mathbf{X}_{kn}(p)) = (\mathbf{e}_m , [\mathbf{e}_k , \mathbf{e}_n])\det(\mathbf{L} - p\,\mathbf{I}) = 0$ при любом $m = 1, 2, 3$ в силу равенства $\det(\mathbf{L} - p\,\mathbf{I}) = 0$. Следовательно, решение уравнения (2.40) определяется одной из формул:

$$\mathbf{N}(p) = \mathbf{X}_{kn}(p) \,/\, |\mathbf{X}_{kn}(p)| \, , \tag{2.42}$$

где $k, n = 1, 2; 2, 3; 3, 1$.

Формулы (2.41), (2.42) решают задачу построения нормалей к плоскостям, ориентационно неизменным при деформации $\mathbf{L}$. Заметим однако, что формула (2.41) не очень удобна в практическом отношении и ее следует преобразовать, выразив явно через ортогональное преобразование $\mathbf{\Omega}$ или через его параметры. Это дает

$$\mathbf{X}_{kn} = \mathbf{F}[\mathbf{e}_k , \mathbf{e}_n] \, ,$$

где $\mathbf{F} = (p^2 + pJ_1)\mathbf{I} + p\mathbf{E}\boldsymbol{\Omega}^* + |\mathbf{E}|\boldsymbol{\Omega}\mathbf{E}^{-1}$,
или

$$\mathbf{X}_{kn} = (\mathbf{e}_k, \mathbf{F}[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n])\mathbf{e}_k + (\mathbf{e}_n, \mathbf{F}[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n])\mathbf{e}_n + ([\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n], \mathbf{F}[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n])[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n]\,. \tag{2.43}$$

Координаты вектора (2.43) можно представить в виде

$$(\mathbf{e}_k, \mathbf{F}[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n]) = E_k\{(E_n - p)(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{e}_n)\sin\Psi +$$

$$+ (E_n + p)(1 - \cos\Psi)(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{e}_k)(\boldsymbol{\lambda}, [\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n])\},$$

$$(\mathbf{e}_n, \mathbf{F}[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n]) = E_n\{-(E_k - p)(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{e}_k)\sin\Psi +$$
$$+ (E_k + p)(1 - \cos\Psi)(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{e}_n)(\boldsymbol{\lambda}, [\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n])\},$$

$$([\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n], \mathbf{F}[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n]) = p^2 + J_1 p + (p|\mathbf{E}|E_k^{-1}E_n^{-1} + E_k E_n)[\cos\Psi +$$

$$+ (1 - \cos\Psi)(\boldsymbol{\lambda}, [\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_n])^2]\,.$$

Переход к явным выражениям для нормалей осуществляется наиболее просто, если $\boldsymbol{\lambda}$ – собственный вектор тензора $\mathbf{E}$, соответствующий собственному значению его, равному $|\mathbf{E}|$. Именно так обстоит дело в случаях, предусмотренных соотношениями (2.10а), (2.12а), (2.14а), (2.15а). Рассмотрим эти случаи.

Пусть

$$E_3 < E_2 \le E_1 = |\mathbf{E}|\,. \tag{2.44}$$

Тогда вектор $\boldsymbol{\lambda}$ лежит в плоскости собственных векторов $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ тензора $\mathbf{E}$ (см. формулы (2.11), (2.13)), $\mathbf{E}\,\boldsymbol{\lambda} = |\mathbf{E}|\,\boldsymbol{\lambda}$, $\mathbf{L}^*\boldsymbol{\lambda} = |\mathbf{E}|\,\boldsymbol{\lambda}$, $\mathbf{L}\,\boldsymbol{\lambda} = |\mathbf{E}|\,\boldsymbol{\lambda}$ и уравнению (2.40) при $p = |\mathbf{E}|$ удовлетворяет вектор $\mathbf{N}|_{p=|\mathbf{E}|} = \boldsymbol{\lambda}$, а при $p = 1$ – вектор

$$\mathbf{N}|_{p=1} = [\boldsymbol{\lambda}, (\mathbf{L}-\mathbf{I})\mathbf{e}_3] \big/ \big|[\boldsymbol{\lambda}, (\mathbf{L}-\mathbf{I})\mathbf{e}_3]\big| = (-E_3\mathbf{e}_3 + [\mathbf{e}_3, \boldsymbol{\lambda}]) \big/ \sqrt{1+E_3^2}\,.$$

Таким образом, при собственно деформации $\mathbf{E}$, отвечающей соотношениям (2.44), ортогональное преобразование $\boldsymbol{\Omega}$ и составляющие (1.26), (1.29) тензора (1.40) определяются формулой

$$\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{I}\cos\Psi + (1 - \cos\Psi)\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\lambda} + \sin\Psi\,(\mathbf{e}_3\cdot[\mathbf{e}_3, \boldsymbol{\lambda}] - [\mathbf{e}_3, \boldsymbol{\lambda}]\cdot\mathbf{e}_3)\,,$$

где $\cos\Psi = 2E_3/(1 + E_3^2)$, $\sin\Psi = (1 - E_3^2)/(1 + E_3^2)$,

и формулами:

$$\boldsymbol{\nu}_1 = \mathbf{N}_1 = (-E_3\mathbf{e}_3 + [\mathbf{e}_3, \boldsymbol{\lambda}]) \big/ \sqrt{1+E_3^2}\,, \tag{2.45a}$$

$$\mathbf{v}_2 = [\mathbf{N}_3,\ \mathbf{N}_1]/|[\mathbf{N}_3,\ \mathbf{N}_1]| = (\mathbf{e}_3 + E_3[\mathbf{e}_3,\ \boldsymbol{\lambda}])/\sqrt{1+E_3^2}\ ,$$

$$\mathbf{v}_3 = \mathbf{N}_3 = \boldsymbol{\lambda}\ ; \qquad (2.45б)$$

$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{v}_1,\quad \mathbf{v}^2 = \mathbf{v}_2\ ,\quad \mathbf{v}^3 = \mathbf{v}_3\ ;$$

$$\mathbf{E}^2\mathbf{v}_2 = (E_3^{-1} - E_3)\,\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = (E_3^2\mathbf{e}_3 + E_3^{-1}[\mathbf{e}_3,\ \boldsymbol{\lambda}])/\sqrt{1+E_3^2}\,.$$

Случаю $E_2 = E_1 = |\mathbf{E}|$ в (2.45) соответствует

$$\boldsymbol{\lambda} = \cos\varphi\ \mathbf{e}_1 + \sin\varphi\ \mathbf{e}_2\,, \qquad 0 \le \varphi < 2\pi\,,$$

а случаю $E_2 < E_1 = |\mathbf{E}|$ отвечают

$$\boldsymbol{\lambda} = \eta\mathbf{e}_1\,,\quad \eta = \pm 1\,. \qquad (2.46)$$

Если же собственно деформация $\mathbf{E}$ отвечает соотношениям

$$E_3 = |\mathbf{E}| \le E_2 < E_1\,,$$

то

$$\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{I}\cos\Psi + (1-\cos\Psi)\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\lambda} + \sin\Psi\,([\boldsymbol{\lambda}\,,\mathbf{e}_1]\cdot\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1\cdot[\boldsymbol{\lambda}\,,\mathbf{e}_1])\,,$$

где

$$\cos\Psi = 2E_1/(E_1^2+1)\,;\quad \sin\Psi = (E_1^2 - 1)/(E_1^2+1)\,,$$

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{N}_1 = (-E_1\mathbf{e}_1 + [\boldsymbol{\lambda},\mathbf{e}_1])/\sqrt{1+E_1^2}\ , \qquad (2.47а)$$

$$\mathbf{v}_2 = [\mathbf{N}_3,\ \mathbf{N}_1]/|[\mathbf{N}_3,\ \mathbf{N}_1]| = -(\mathbf{e}_1 + E_1[\boldsymbol{\lambda},\mathbf{e}_1])/\sqrt{1+E_1^2}\ ,$$

$$\mathbf{v}_3 = \mathbf{N}_3 = \boldsymbol{\lambda}\ ; \qquad (2.47б)$$

$$\mathbf{v}^1 = \mathbf{v}_1,\quad \mathbf{v}^2 = \mathbf{v}_2\ ,\quad \mathbf{v}^3 = \mathbf{v}_3\ ;$$

$$\mathbf{E}^2\mathbf{v}_2 = (E_1 - E_1^{-1})\,\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = -(E_1^2\mathbf{e}_1 + E_1^{-1}[\boldsymbol{\lambda},\mathbf{e}_1])/\sqrt{1+E_1^2}\ .$$

Случаю $E_3 = |\mathbf{E}| = E_2$ в (2.47) соответствует

$$\boldsymbol{\lambda} = \cos\varphi\ \mathbf{e}_2 + \sin\varphi\ \mathbf{e}_3\,, \qquad 0 \le \varphi < 2\pi\,,$$

а случаю $E_3 = |\mathbf{E}| < E_2$ отвечает

$$\boldsymbol{\lambda} = \eta\mathbf{e}_3\,,\quad \eta = \pm 1\,. \qquad (2.48)$$

Более громоздкие выражения для нормалей к ориентационно неизменным плоскостям получаются при собственно деформации $\mathbf{E}$, отвечающей какому-либо из соотношений (2.16а), (2.17а), (2.18а), (2.19а). В этих случаях параметры преобразования $\boldsymbol{\Omega}$ определяются формулами (2.24) – (2.29) и в формулах (2.42), (2.43) можно положить $k = 1$, $n = 2$, что дает

$$\mathbf{N}(p) = \mathbf{X}_{12}(p) / |\mathbf{X}_{12}(p)|,$$

$$\mathbf{X}_{12} = \mathbf{F}\mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^{3} (\mathbf{e}_i, \mathbf{X}_{12})\mathbf{e}_i .$$

Здесь

$$(\mathbf{e}_1, \mathbf{X}_{12}) = (\mathbf{e}_1, \mathbf{F}\mathbf{e}_3) =$$

$$= E_1\Big[\eta a_1 a_3 (E_2 + p)(1 - C)\cos\varphi\sqrt{\cos^2\theta_0 - K\sin^2\varphi} +$$

$$+ a_2(E_2 - p)\sin\varphi\sqrt{(1 - C^2)(1 - K\sin^2\varphi)}\,\Big]\sin\theta_0 ,$$

$$(\mathbf{e}_2, \mathbf{X}_{12}) = (\mathbf{e}_2, \mathbf{F}\mathbf{e}_3) =$$

$$= E_2\Big[\eta a_2 a_3 (E_1 + p)(1 - C)\sin\varphi\sqrt{\cos^2\theta_0 - K\sin^2\varphi} -$$

$$- a_1(E_1 - p)\cos\varphi\sqrt{(1 - C^2)(1 - K\sin^2\varphi)}\,\Big]\sin\theta_0 ,$$

$$(\mathbf{e}_3, \mathbf{X}_{12}) = (\mathbf{e}_3, \mathbf{F}\mathbf{e}_3) =$$

$$= (1 - K\sin^2\varphi)\Big\{p^2 + pJ_1 + (E_1E_2 + pE_3)\big[a_3^2 - (a_3^2 - 1)C\big]\Big\} -$$

$$- a_3^2\sin^2\theta_0(E_1E_2 + pE_3)(1 - C),$$

где φ принимает значения из интервала $[0, 2\pi)$, если $E_2 > |\mathbf{E}|$, а при $E_2 < |\mathbf{E}|$ – из интервалов (2.23).

2.5. Ориентационно неизменные плоскости в случае двукратного вырождения собственных значений тензора E

Формулы для нормалей к ориентационно неизменным плоскостям заметно упрощаются, если

$$E_3 < |\mathbf{E}| < E_2 = E_1 . \qquad (2.49)$$

Такие соотношения свойственны, например, собственным значениям тензора Бейна (1.5). Нормали $\mathbf{N}_1 = \mathbf{N}(p)|_{p = L_1 = L_2 = 1}$, $\mathbf{N}_3 = \mathbf{N}(p)|_{p = L_3 = |\mathbf{E}|}$ к ориентационно неизменным плоскостям в этом случае преобразуются к виду

$$\mathbf{N}_1 = \omega\mathbf{N}_{10}, \qquad \mathbf{N}_3 = \omega\mathbf{N}_{30}, \qquad (2.50)$$

где ω – поворот на угол φ вокруг оси $\mathbf{e}_3$ (см. формулу (2.25)).

В формуле (2.50)

$$\mathbf{N}_{10} = \eta\zeta_1\mathbf{e}_1 - \varepsilon_1\mathbf{e}_2 + \sigma_1\mathbf{e}_3, \tag{2.51}$$

причем

$$\zeta_1 = \sqrt{\frac{E_1(1-E_1E_3)}{2(E_1-E_3)}}\ ;\ \varepsilon_1 = \sqrt{\frac{E_1(1+E_1E_3)}{2(E_1+E_3)}}\ ;\ \sigma_1 = E_3\sqrt{\frac{(E_1^2-1)}{(E_1^2-E_3^2)}}\ ;$$

$$\eta = \pm 1, \tag{2.52}$$

$$\mathbf{N}_{30} = \eta\zeta_3\mathbf{e}_1 - \varepsilon_3\mathbf{e}_2 + \sigma_3\mathbf{e}_3, \tag{2.53}$$

причем

$$\zeta_3 = \frac{E_1-1}{E_1(1-E_3)}\sqrt{\frac{(E_1^2-1)(1+E_1E_3)}{2E_1(E_1-E_3)}}\ ;\ \varepsilon_3 = \frac{E_1+1}{E_1(1-E_3)}\sqrt{\frac{(E_1^2-1)(1-E_1E_3)}{2E_1(E_1+E_3)}}\ ;$$

$$\sigma_3 = E_1^{-1}\sqrt{(1-E_1^2E_3^2)/(E_1^2-E_3^2)}\ . \tag{2.54}$$

Подстановка (2.50) в (1.26), (1.29) приводит к выражениям:

$$\mathbf{v}_1 = \omega\mathbf{v}_{10}, \qquad \mathbf{v}_2 = \omega\mathbf{v}_{20}, \qquad \mathbf{v}_3 = \omega\mathbf{v}_{30}, \tag{2.55а}$$

$$\mathbf{v}^1 = \omega\mathbf{v}_0^1, \qquad \mathbf{v}^2 = \omega\mathbf{v}_0^2, \qquad \mathbf{v}^3 = \omega\mathbf{v}_0^3, \tag{2.55б}$$

из которых следует, что поведение составляющих (1.26), (1.29) тензора (1.40) при изменении φ также подчиняется вращательному закону, где

$$\mathbf{v}_{10} = \mathbf{N}_{10}, \quad \mathbf{v}_{30} = \mathbf{N}_{30},$$

$$\mathbf{v}_{20} = \mathbf{v}_0^2 = [\mathbf{N}_{30}, \mathbf{N}_{10}]/\left|[\mathbf{N}_{30}, \mathbf{N}_{10}]\right|, \tag{2.56а}$$

$$\mathbf{v}_0^1 = [\mathbf{N}_{30}, [\mathbf{N}_{10}, \mathbf{N}_{30}]]/\left|[\mathbf{N}_{30}, \mathbf{N}_{10}]\right|^2, \tag{2.56б}$$

$$\mathbf{v}_0^3 = [\mathbf{N}_{10}, [\mathbf{N}_{30}, \mathbf{N}_{10}]]/\left|[\mathbf{N}_{30}, \mathbf{N}_{10}]\right|^2, \tag{2.56в}$$

$$\left|\mathbf{v}_0^1\right| = \left|\mathbf{v}_0^3\right| = 1/\left\|[\mathbf{N}_{30}, \mathbf{N}_{10}]\right\|, \ \left|[\mathbf{N}_{30}, \mathbf{N}_{10}]\right| = \left\|\mathbf{E}\right| - 1\right|/[E_1(1-E_3)]\ . \tag{2.57}$$

Переходя в (2.56) к явным выражениям (2.51), (2.53) для векторов $\mathbf{N}_{10}$, $\mathbf{N}_{30}$, будем иметь

$$\mathbf{v}_{20} = \mathbf{v}_0^2 = -\left[(\left|\mathbf{E}\right|-1)/\left\|\mathbf{E}\right|-1\right|\right](E_1^{-1}\zeta_1\mathbf{e}_1 + \eta E_1^{-1}\varepsilon_1\mathbf{e}_2 + \eta E_3^{-1}\sigma_1\mathbf{e}_3), \tag{2.58а}$$

$$\mathbf{v}_0^1 = [(1-E_3)/(|\mathbf{E}|-1)]\{-\eta\,[\varepsilon_1\sigma_3 + (E_1/E_3)\,\varepsilon_3\sigma_1]\mathbf{e}_1 +$$

$$+ [\zeta_1\sigma_3 - (E_1/E_3)\,\zeta_3\sigma_1\,]\mathbf{e}_2 + (\,\zeta_1\varepsilon_3 + \zeta_3\varepsilon_1\,)\mathbf{e}_3\,\}\,, \tag{2.58б}$$

$$\mathbf{v}_0^3 = [(1-E_3)/(|\mathbf{E}|-1)]\{\,\eta\varepsilon_1\sigma_1\,[\,(E_1/E_3) + 1]\mathbf{e}_1 +$$

$$+ \zeta_1\sigma_1\,[\,(E_1/E_3) - 1]\mathbf{e}_2 - 2\zeta_1\varepsilon_1\mathbf{e}_3\,\}\,. \tag{2.58в}$$

Тензор $\mathbf{E}$, собственные значения E_1 и E_2 которого равны (см. соотношения (2.49)), перестановочен с поворотом $\boldsymbol{\omega}$ (2.25). Учитывая это обстоятельство и используя формулы (2.55), тензор (1.40) можно выразить в виде произведения

$$\mathbf{L} = \boldsymbol{\omega}\mathbf{L}_0\boldsymbol{\omega}^*\,. \tag{2.59}$$

Здесь

$$\mathbf{L}_0 = \mathbf{v}_0^1\cdot\mathbf{v}_{10} + \mathbf{v}_0^2\cdot\mathbf{E}^2\mathbf{v}_{20} + |\mathbf{E}|\,\mathbf{v}_0^3\cdot\mathbf{v}_{30}\,, \tag{2.60}$$

где

$$\mathbf{E}^2 = E_1^2\mathbf{I} + (E_3^2 - E_1^2)\,\mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_3\,.$$

Ортогональное преобразование $\boldsymbol{\Omega}$, восстанавливающее ориентацию плоскостей с нормалями (2.50) после собственно деформации $\mathbf{E}$, также раскладывается в произведение $\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\Omega}_0\boldsymbol{\omega}^*$. Здесь

$$\boldsymbol{\Omega}_0 = C_0\mathbf{I} + (1-C_0)\boldsymbol{\lambda}_0\cdot\boldsymbol{\lambda}_0 + \sqrt{1-C_0^2}\;\mathbf{U}_{\lambda_0}\,, \tag{2.61}$$

где

$$\boldsymbol{\lambda}_0 = \sqrt{1-\Lambda}\,\mathbf{e}_1 + \eta\sqrt{\Lambda}\,\mathbf{e}_3\;;$$

C_0 и Λ определяются формулами (2.39).

Связь тензора (2.60) с преобразованием (2.61) устанавливается формулой $\mathbf{L}_0 = \boldsymbol{\Omega}_0\mathbf{E}$.

Достаточно просто обстоит дело и в тех случаях, когда собственные значения тензора $\mathbf{E}$ удовлетворяют соотношениям:

$$E_3 = E_2 < |\mathbf{E}| < E_1\,. \tag{2.62}$$

Тогда нормали $\mathbf{N}_1 = \mathbf{N}(p)|_{p = L_1 = L_2 = 1}$, $\mathbf{N}_3 = \mathbf{N}(p)|_{p = L_3 = |\mathbf{E}|}$ к ориентационно неизменным плоскостям выражаются формулами:

$$\mathbf{N}_1 = \boldsymbol{\omega}_1\mathbf{N}_{10}\,, \qquad \mathbf{N}_3 = \boldsymbol{\omega}_1\mathbf{N}_{30}\,, \tag{2.63}$$

где $\boldsymbol{\omega}_1 = \mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_1 + (\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_3)\cos\varphi + (\mathbf{e}_3\cdot\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_3)\sin\varphi$ – поворот на угол φ $(0 \le \varphi < 2\pi)$ вокруг оси $\mathbf{e}_1$;

$$\mathbf{N}_{10} = \sigma'_1 \mathbf{e}_1 + \eta\, \zeta'_1 \mathbf{e}_2 + \varepsilon'_1 \mathbf{e}_3\,,$$

причем

$$\sigma'_1 = E_1\sqrt{\frac{1-E_3^2}{E_1^2-E_3^2}}\ ;\ \zeta'_1 = \sqrt{\frac{E_3(E_1E_3-1)}{2(E_1-E_3)}}\ ;\ \varepsilon'_1 = \sqrt{\frac{E_3(E_1E_3+1)}{2(E_1+E_3)}}\ ;\ \eta = \pm 1;$$

$$\mathbf{N}_{30} = \sigma'_3 \mathbf{e}_1 + \eta\, \zeta'_3 \mathbf{e}_2 + \varepsilon'_3 \mathbf{e}_3\,,$$

причем

$$\sigma'_3 = E_3^{-1}\sqrt{(E_1^2E_3^2-1)/(E_1^2-E_3^2)}\ ;\ \ \zeta'_3 = \frac{1-E_3}{E_3(E_1-1)}\sqrt{\frac{(1-E_3^2)(E_1E_3+1)}{2E_3(E_1-E_3)}}\ ;$$

$$\varepsilon'_3 = \frac{1+E_3}{E_3(E_1-1)}\sqrt{\frac{(1-E_3^2)(E_1E_3-1)}{2E_3(E_1+E_3)}}\ .$$

Подстановка (2.63) в (1.26), (1.29) дает

$$\nu_1 = \omega_1\nu_{10}\,,\quad \nu_2 = \omega_1\nu_{20}\,,\quad \nu_3 = \omega_1\nu_{30}\,,$$

$$\mathbf{v}^1 = \omega_1\mathbf{v}_0^1\,,\quad \mathbf{v}^2 = \omega_1\mathbf{v}_0^2\,,\quad \mathbf{v}^3 = \omega_1\mathbf{v}_0^3\,,$$

где

$$\nu_{10} = \mathbf{N}_{10}\,;\quad \nu_{30} = \mathbf{N}_{30}\,;\quad \nu_{20} = \mathbf{v}_0^2 = [\mathbf{N}_{30},\, \mathbf{N}_{10}]/|[\mathbf{N}_{30},\, \mathbf{N}_{10}]|\,;$$

$$\mathbf{v}_0^1 = [\mathbf{N}_{30},\, [\mathbf{N}_{10},\, \mathbf{N}_{30}]]/|[\mathbf{N}_{30},\, \mathbf{N}_{10}]|^2\,;$$

$$\mathbf{v}_0^3 = [\mathbf{N}_{10},\, [\mathbf{N}_{30},\, \mathbf{N}_{10}]]/|[\mathbf{N}_{30},\, \mathbf{N}_{10}]|^2\,;$$

$$|[\mathbf{N}_{30},\, \mathbf{N}_{10}]| = \big|1-|\mathbf{E}|\big|/[E_3(E_1-1)]\,,$$

или, в явном виде:

$$\nu_{20} = \mathbf{v}_0^2 = [(1-|\mathbf{E}|)/\big|1-|\mathbf{E}|\big|](\eta E_1^{-1}\sigma'_1\mathbf{e}_1 + E_3^{-1}\zeta'_1\mathbf{e}_2 - \eta E_3^{-1}\varepsilon'_1\mathbf{e}_3)\,,$$

$$\mathbf{v}_0^1 = [(E_1-1)/(1-|\mathbf{E}|)]\{(\zeta'_1\varepsilon'_3 + \varepsilon'_1\zeta'_3)\mathbf{e}_1 -$$

$$-\eta\,[\varepsilon'_1\sigma'_3 + (E_3/E_1)\sigma'_1\varepsilon'_3]\mathbf{e}_2 + + [(E_3/E_1)\sigma'_1\zeta'_3 - \zeta'_1\sigma'_3]\mathbf{e}_3\}\,,$$

$$\mathbf{v}_0^3 = [(E_1-1)/(1-|\mathbf{E}|)]\{-2\zeta'_1\varepsilon'_1\mathbf{e}_1 + \eta\varepsilon'_1\sigma'_1[1+(E_3/E_1)]\mathbf{e}_2 +$$

$$+\sigma'_1\zeta'_1[1-(E_3/E_1)]\mathbf{e}_3\}\,.$$

Тензор (1.40) и ортогональное преобразование $\mathbf{\Omega}$ выражаются в виде произведений:

$$\mathbf{L} = \omega_1 \mathbf{L}_0 \omega_1^*, \quad \mathbf{\Omega} = \omega_1 \mathbf{\Omega}_0 \omega_1^*.$$

Здесь

$$\mathbf{L}_0 = \mathbf{v}_0^1 \cdot \mathbf{v}_{10} + \mathbf{v}_0^2 \cdot \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_{20} + |\mathbf{E}|\, \mathbf{v}_0^3 \cdot \mathbf{v}_{30}\,; \tag{2.64}$$

$$\mathbf{\Omega}_0 = C_0 \mathbf{I} + (1 - C_0)\boldsymbol{\lambda}_0 \cdot \boldsymbol{\lambda}_0 + \sqrt{1 - C_0^2}\, \mathbf{U}_{\lambda_0}, \tag{2.65}$$

где

$$\mathbf{E}^2 = E_3^2 \mathbf{I} + (E_1^2 - E_3^2)\, \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3\,;$$

$$\boldsymbol{\lambda}_0 = \eta\sqrt{\Lambda'}\, \mathbf{e}_1 + \sqrt{1 - \Lambda'}\, \mathbf{e}_2\,;$$

C_0 и Λ' определяются формулами (2.36), (2.38).

Связь тензора (2.64) с преобразованием (2.65) устанавливается формулой $\mathbf{L}_0 = \mathbf{\Omega}_0 \mathbf{E}$.

Соотношения (2.62) характерны для собственных значений $E_1 = \dfrac{1}{\kappa\tau}$, $E_3 = E_2 = \dfrac{1}{\kappa\sqrt{2}}$ тензора Бейна $\mathbf{E} = E_1\, \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1 + E_3\, (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3)$, описывающего $\alpha \to \gamma$ перестройку [16].

Заключительные замечания

Итак, все возможные варианты соотношений между собственными значениями собственно деформации решетки X в решетку r, совместимые с ограничениями

$$E_3 < 1 < E_1\,,\ E_3 \le E_2 \le E_1\,,\ E_2 \ne 1\,,\ E_3 \le E_1 E_2 E_3 \le E_1\,,\ E_1 E_2 E_3 \ne 1\,, \tag{2.66}$$

рассмотрены. Для каждого из этих вариантов существуют и установлены ориентационно неизменные плоскости, отвечающие выделенным (см. п. 1.4) собственным значениям тензора $\mathbf{L}$:

$$L_1 = L_2 = 1\,, \quad L_3 = |\mathbf{E}|\,. \tag{2.67}$$

Нормали к ориентационно неизменным плоскостям зависят, как правило, от двух параметров: параметра $\eta = \pm 1$ и угла φ (исключение составляют случаи $E_3 < E_2 < E_1 = |\mathbf{E}|$, $E_3 = |\mathbf{E}| < E_2 < E_1$ (см. формулы (2.45), (2.46), (2.47), (2.48)), так как от η и φ зависит ориентация оси $\boldsymbol{\lambda}$ поворота $\boldsymbol{\Omega}$, а в случаях (2.16а) – (2.18а) – и величина угла поворота.

Следовательно, ни взаимное расположение узлов в каждой из решеток X и r, связанных деформацией (1.1), ни ограничения (2.67) на собственные значения тензора $\mathbf{L}$ однозначно не определяют ортогональное преобразование $\boldsymbol{\Omega}$ в (1.2) и сам тензор $\mathbf{L}$.

Глава 3. ДИСКРЕТНОЕ ОПИСАНИЕ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ИНВАРИАНТОВ ДЕФОРМАЦИОННОГО $\gamma \to \alpha$ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ СОБСТВЕННО ДЕФОРМАЦИИ γ-РЕШЕТКИ ПО БЕЙНУ

Преобразование решетки X в решетку r посредством однородной деформации (1.1) может оказаться совместимым с принципом идеального сопряжения фаз по инвариантной плоскости при собственно деформации **E** с собственными значениями E_1, E_2, E_3, отвечающими ограничениям (2.66), поскольку в этом случае выполняется одно из необходимых условий существования плоскости, общей для решеток превращающихся фаз, а именно: имеется семейство $\{\Pi_3(\eta, \varphi)\}$ плоскостей с нормалями $\mathbf{N}_3 = \mathbf{N}_3(\eta, \varphi)$, в каждой из которых деформация **E** не изменяет площадь и расстояние вдоль одного из направлений. Таким образом, если допустить, что преобразование решетки X в решетку r реализуемо посредством деформации с инвариантной плоскостью, то эту плоскость следует искать в семействе ориентационно неизменных плоскостей $\{\Pi_3(\eta, \varphi)\}$. Некоторые свидетельства в пользу этого утверждения, в частности существование семейств $\{\Pi_3(\eta, \varphi)\}$ ориентационно неизменных плоскостей, ориентационно близких к габитусным плоскостям кристаллов α-мартенсита, наблюдаемых при мартенситном $\gamma \to \alpha$ превращении в сплавах железа, были получены в работе В.П. Верещагина, В.Н. Горелова на примере деформационного $\gamma \to \alpha$ превращения [16].

Однако их нельзя расценивать как доказательство возможности преобразования решетки γ в решетку α путем однородной деформации (см. (1.66) или (1.80)) с инвариантной плоскостью, так как не установлена тождественность плоскостей семейств $\{\Pi_3(\eta, \varphi)\}$ кристаллографическим плоскостям преобразуемой решетки γ.

Действительно, дискретные модели, такие как решетки γ и α, отвечающие представлениям о кристаллическом строении фаз γ и α, в исследованиях, приведенных выше (см. гл. 2), явным образом не использовались, т. е. мартенситное $\gamma \to \alpha$ превращение, по существу, описывалось как деформационное преобразование сплошной среды (континуума).

Дискретной имитацией пространственно периодического распределения вещества в исходной γ-фазе, пригодной для перехода от континуального описания ориентационных инвариантов деформационного преобразования (1.40) к дискретному, может служить двухмерная решетка, построенная на векторах (1.60а) или (1.81) в плоскости Π_3 (см. п. 1.5 и п. 1.6).

Решетка эта – инвариант деформационных преобразований (1.66) и (1.80) в том смысле, что при деформациях (1.66) и (1.80) она совмещается сама с собой. Остается только убедиться в совместимости ее с двухмерной решеткой, образуемой узлами исходной решетки γ, лежащими в плоскости Π_3. Изучение условий, необходимых для такой совместимости, является задачей настоящей главы.

3.1. Решетка γ

Обозначим через γ_1, γ_2, γ_3 базисные векторы решетки γ и представим их в виде разложений:

$$\gamma_1 = a_\gamma(\mathbf{e}_2^\gamma + \mathbf{e}_3^\gamma)/2\ , \quad \gamma_2 = a_\gamma(\mathbf{e}_1^\gamma + \mathbf{e}_3^\gamma)/2\ , \quad \gamma_3 = a_\gamma(\mathbf{e}_1^\gamma + \mathbf{e}_2^\gamma)/2\ , \tag{3.1}$$

где

$$\mathbf{e}_1^\gamma = [1\,0\,0]_\gamma\ , \qquad \mathbf{e}_2^\gamma = [0\,1\,0]_\gamma\ , \qquad \mathbf{e}_3^\gamma = [0\,0\,1]_\gamma \tag{3.2}$$

суть правая тройка ортов, направленных вдоль осей симметрии четвертого порядка γ-решетки.

Тогда радиус-вектор $\mathbf{X}$ любого узла решетки γ можно выразить формулой

$$\mathbf{X} = n_1\gamma_1 + n_2\gamma_2 + n_3\gamma_3\ , \tag{3.3а}$$

используя в качестве базиса векторы (3.1), или формулой

$$\mathbf{X} = a_\gamma(m_1\mathbf{e}_1^\gamma + m_2\mathbf{e}_2^\gamma + m_3\mathbf{e}_3^\gamma)/2 = a_\gamma[m_1\ m_2\ m_3]_\gamma/2\ , \tag{3.3б}$$

используя в качестве базиса орты (3.2),

где

$$m_1 = n_2 + n_3\ , \quad m_2 = n_3 + n_1\ , \quad m_3 = n_1 + n_2\ , \tag{3.4а}$$

и, обратно,

$$n_1 = (-m_1 + m_2 + m_3)/2,\ n_2 = (m_1 - m_2 + m_3)/2,\ n_3 = (m_1 + m_2 - m_3)/2, \tag{3.4б}$$

Переменные n_1, n_2, n_3 в (3.3а) принимают любые целочисленные значения. Иначе обстоит дело с переменными m_1, m_2, m_3 в (3.3б), поскольку уравнения (3.4а) разрешаются относительно n_1, n_2, n_3 в целых числах (см. формулы (3.4б)), если выполнено одно из следующих четырех требований:

$$m_1 = 2m'_1, \qquad m_2 = 2m'_2, \qquad m_3 = 2m'_3, \tag{3.5а}$$

$$m_1 = 2m'_1, \qquad m_2 = 2m'_2 + 1, \quad m_3 = 2m'_3 + 1, \tag{3.5б}$$

$$m_1 = 2m'_1 + 1, \quad m_2 = 2m'_2, \qquad m_3 = 2m'_3 + 1, \tag{3.5в}$$

$$m_1 = 2m'_1 + 1, \quad m_2 = 2m'_2 + 1, \quad m_3 = 2m'_3, \tag{3.5г}$$

где $m'_1, m'_2, m'_3, = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.

Выбор значений переменных m_1, m_2, m_3 удобно систематизировать, объединяя в отдельные группы все узлы, удаленные от начала O на одно и то же расстояние

$$R_{KC} = a_\gamma \sqrt{M}/2, \tag{3.6}$$

где

$$M = m_1^2 + m_2^2 + m_3^2, \tag{3.7}$$

в кристаллографически эквивалентных направлениях $< m_1 \; m_2 \; m_3 >_\gamma$.

Независимо задаваемой переменной в этом случае будет M, а областью допустимых значений ее будет, в силу (3.7) и (3.5), множество четных натуральных чисел. Значения целочисленных координат m_1, m_2, m_3 узлов решетки γ, принадлежащих сфере радиуса (3.6), находятся тогда из решения системы уравнений

$$\begin{cases} m_1 = 2m'_1, \;\; m_2 = 2m'_2, \;\; m_3 = 2m'_3, \\ M = 4M', \\ m_1'^2 + m_2'^2 + m_3'^2 = M', \end{cases} \tag{3.8а}$$

где M' – натуральное число, если m_1, m_2, m_3 – четные числа,

или систем уравнений:

$$\begin{cases} m_1 = 2m'_1, \;\; m_2 = 2m'_2 - 1, \;\; m_3 = 2m'_3 - 1, \\ M = 2M', \\ 2[m_1'^2 + m'_2(m'_2 - 1) + m'_3(m'_3 - 1)] + 1 = M', \end{cases} \tag{3.8б}$$

$$\begin{cases} m_1 = 2m'_1 - 1, \;\; m_2 = 2m'_2, \;\; m_3 = 2m'_3 - 1, \\ M = 2M', \\ 2[m'_1(m'_1 - 1) + m_2'^2 + m'_3(m'_3 - 1)] + 1 = M', \end{cases} \tag{3.8в}$$

$$\begin{cases} m_1 = 2m'_1 - 1, \;\; m_2 = 2m'_2 - 1, \;\; m_3 = 2m'_3, \\ M = 2M', \\ 2[m'_1(m'_1 - 1) + m'_2(m'_2 - 1) + m_3'^2] + 1 = M', \end{cases} \tag{3.8г}$$

где M' – нечетное натуральное число, если m_1, m_2, m_3 – числа различной четности.

Такая систематизация позволяет выбирать векторы решетки γ, которые заведомо имеют минимальную длину в каждом из кристаллографических направлений и определяют, следовательно, период решетки γ в этом направлении.

Сфера радиуса $R_{КС}$ называется далее координационной сферой, если при заданном значении M среди узлов решетки γ найдутся узлы, удаленные от начала O на расстояние $R_{КС}$. Представление о распределении узлов решетки γ по координационным сферам можно получить, обратившись к табл. 3.1.

Таблица 3.1

Координационные сферы в решетке γ

$N_{КС}$	M	$R_{КС}$	$<m_1\, m_2\, m_3>_\gamma/2$	$Z_{КС}$
1	2	$\sqrt{2}/2$	$<011>_\gamma/2$	12
2	4	1	$<002>_\gamma/2$	6
3	6	$\sqrt{6}/2$	$<112>_\gamma/2$	24
4	8	$\sqrt{2}$	$<022>_\gamma/2$	12
5	10	$\sqrt{10}/2$	$<013>_\gamma/2$	24
6	12	$\sqrt{3}$	$<222>_\gamma/2$	8
7	14	$\sqrt{14}/2$	$<123>_\gamma/2$	48
8	16	2	$<004>_\gamma/2$	6
9	18	$3\sqrt{2}/2$	$<033>_\gamma/2$ $<114>_\gamma/2$	36
10	20	$\sqrt{5}$	$<024>_\gamma/2$	24
11	22	$\sqrt{22}/2$	$<233>_\gamma/2$	24

Продолжение табл. 3.1

N_{KC}	M	R_{KC}	$<m_1\ m_2\ m_3>_\gamma/2$	Z_{KC}
12	24	$\sqrt{6}$	$<2\,2\,4>_\gamma/2$	24
13	26	$\sqrt{26}/2$	$<0\,1\,5>_\gamma/2$ $<1\,3\,4>_\gamma/2$	72
14	30	$\sqrt{30}/2$	$<1\,2\,5>_\gamma/2$	48
15	32	$2\sqrt{2}$	$<0\,4\,4>_\gamma/2$	12
16	34	$\sqrt{34}/2$	$<0\,3\,5>_\gamma/2$ $<3\,3\,4>_\gamma/2$	48
17	36	3	$<0\,0\,6>_\gamma/2$ $<2\,4\,4>_\gamma/2$	30
18	38	$\sqrt{38}/2$	$<1\,1\,6>_\gamma/2$ $<2\,3\,5>_\gamma/2$	72
19	40	$\sqrt{10}$	$<0\,2\,6>_\gamma/2$	24
20	42	$\sqrt{42}/2$	$<1\,4\,5>_\gamma/2$	48
21	44	$\sqrt{11}$	$<2\,2\,6>_\gamma/2$	24
22	46	$\sqrt{46}/2$	$<1\,3\,6>_\gamma/2$	48
23	48	$2\sqrt{3}$	$<4\,4\,4>_\gamma/2$	8
24	50	$5\sqrt{2}/2$	$<0\,5\,5>_\gamma/2$ $<0\,1\,7>_\gamma/2$ $<3\,4\,5>_\gamma/2$	84
25	52	$\sqrt{13}$	$<0\,4\,6>_\gamma/2$	24
26	54	$3\sqrt{6}/2$	$<1\,2\,7>_\gamma/2$ $<2\,5\,5>_\gamma/2$ $<3\,3\,6>_\gamma/2$	96

Окончание табл. 3.1

$N_{КС}$	M	$R_{КС}$	$<m_1\ m_2\ m_3>_\gamma/2$	$Z_{КС}$
27	56	$\sqrt{14}$	$<2\,4\,6>_\gamma/2$	48
28	58	$\sqrt{58}/2$	$<0\,3\,7>_\gamma/2$	24
29	62	$\sqrt{62}/2$	$<1\,5\,6>_\gamma/2$ $<2\,3\,7>_\gamma/2$	96
30	64	4	$<0\,0\,8>_\gamma/2$	6
31	66	$\sqrt{66}/2$	$<1\,4\,7>_\gamma/2$ $<1\,1\,8>_\gamma/2$ $<4\,5\,5>_\gamma/2$	96
32	68	$\sqrt{17}$	$<4\,4\,6>_\gamma/2$ $<0\,2\,8>_\gamma/2$	48
33	70	$\sqrt{70}/2$	$<3\,5\,6>_\gamma/2$	48
34	72	$6\sqrt{2}/2$	$<0\,6\,6>_\gamma/2$ $<2\,2\,8>_\gamma/2$	36
35	74	$\sqrt{74}/2$	$<0\,5\,7>_\gamma/2$ $<1\,3\,8>_\gamma/2$ $<3\,4\,7>_\gamma/2$	120

В первой колонке таблицы приводятся номера $N_{КС}$ координационных сфер, во второй и третьей – соответственно значения M и $R_{КС}$ (в единицах a_γ), в четвертой – семейства $a_\gamma<m_1\ m_2\ m_3>_\gamma/2$ радиус-векторов (в единицах a_γ), определяющих положения узлов на каждой из координационных сфер в кристаллографически эквивалентных направлениях, в пятой – числа $Z_{КС}$ узлов, приходящихся на каждую координационную сферу.

3.2. Решетка ξ^3

Предположим, что деформационное преобразование решетки γ в решетку α описывается тензором (2.59) при собственно деформации решетки γ, описываемой тензором Бейна (1.5) с собственными векторами:

$$\mathbf{e}_1 = (\mathbf{e}_1^\gamma - \mathbf{e}_2^\gamma)/\sqrt{2}\ , \qquad \mathbf{e}_2 = (\mathbf{e}_1^\gamma + \mathbf{e}_2^\gamma)/\sqrt{2}\ , \qquad \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_3^\gamma\ , \tag{3.9}$$

и собственными значениями:

$$E_1 = E_2 = \kappa\sqrt{2}\ ,\ E_3 = \kappa\tau\ . \tag{3.10}$$

Тогда

$$(\mathbf{v}^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_2) = (\mathbf{v}_0^1, \mathbf{E}^2 \mathbf{v}_{20}) = s\eta(E_1^2 - 1)(1 - E_3)/(|\mathbf{E}| - 1)\ ,$$

$$|\mathbf{v}^1| = |\mathbf{v}_0^1| = E_1(1 - E_3)/(|\mathbf{E}| - 1) \tag{3.11}$$

(см. (2.55), (2.56), (2.58), (2.57)) и формулы (1.60), определяющие базисные векторы решетки ξ^3, записываются в виде

$$\xi_1 = \xi_{22}\left[s\eta k\frac{|\mathbf{E}| - 1}{(E_1^2 - 1)(1 - E_3)}\mathbf{v}^1 + \frac{\xi_{12}}{\xi_{22}}\mathbf{v}^2\right], \tag{3.12а}$$

$$\xi_2 = \xi_{22}\mathbf{v}^2, \tag{3.12б}$$

$$\xi_3 = \xi_3^1\xi_1 + \xi_3^2\xi_2 + \xi_3^3\mathbf{v}_3\ , \tag{3.12в}$$

где $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3$ выражаются формулами (2.55б); области допустимых значений параметров ξ_{22}, ξ_3^3, ξ_{12}, ξ_3^1, ξ_3^2 определяются неравенствами (1.62); k – отличное от нуля целое число.

Периоды решетки ξ^3 в направлениях $\xi_2\ /\ |\xi_2|$, $\xi_3\ /\ |\xi_3|$ определяются модулями векторов (3.12б), (3.12в) и могут принимать, в силу неравенств (1.62), любые значения, а допустимые значения периода решетки ξ^3 в направлении $\xi_1\ /\ |\xi_1|$, равного модулю вектора (3.12а), принадлежат интервалу $|\xi_1|_{min} \le |\xi_1| \le |\xi_1|_{max}$, границы которого

$$|\xi_1|_{min} = E_1|k\xi_{22}|/(E_1^2 - 1)\ , \quad |\xi_1|_{max} = |\xi_{22}|\sqrt{(|\xi_1|_{min}/|\xi_{22}|) + (1/4)}$$

зависят от $|\xi_2| = \xi_{22}$.

Элементы произвола имеются также и в выборе ориентации векторов (3.12). Так, их взаимная ориентация и ориентация относительно базиса $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3$ могут варьироваться за счет изменения параметров ξ_{22}, ξ_3^3, ξ_{12}, ξ_3^1, ξ_3^2 в пределах интервалов (1.62). Кроме того, при заданной собственно деформации $\mathbf{E}$ может варьироваться ориентация самого базиса $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3$ за счет его поворота $\boldsymbol{\omega}$ (см. (2.55б), (2.25)) на угол φ вокруг оси $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_3^\gamma$. Поэтому исследование совместимости решеток ξ^3 и γ естественно начать с ограничений на ориентацию базиса $\mathbf{v}^1$, $\mathbf{v}^2$, $\mathbf{v}^3$.

3.3. Ориентация базиса $\mathbf{v}^1$, $\mathbf{v}^2$, $\mathbf{v}^3$

Взаимная ориентация векторов базиса $\mathbf{v}^1$, $\mathbf{v}^2$, $\mathbf{v}^3$ и ориентация его относительно кристаллографического направления $\mathbf{e}_3^\gamma = [0\,0\,1]_\gamma$ зависят лишь от собственно деформации $\mathbf{E}$ (см. формулы (2.55б), (2.58), (2.25)). Поэтому достаточно зафиксировать ориентацию одного из векторов $\mathbf{v}^1$, $\mathbf{v}^2$, $\mathbf{v}^3$ относительно заданного кристаллографического направления решетки γ.

Рассмотрим вектор

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma(m_{21}\mathbf{e}_1^\gamma + m_{22}\mathbf{e}_2^\gamma + m_{23}\mathbf{e}_3^\gamma)/2 \tag{3.13}$$

решетки γ, выделяющий направление

$$\boldsymbol{\Gamma}_2 = \mathbf{X}_2 / |\mathbf{X}_2| = [m_{21}\; m_{22}\; m_{23}]_\gamma / \sqrt{M_2}\ , \tag{3.14}$$

где

$$M_2 = m_{21}^2 + m_{22}^2 + m_{23}^2\ , \tag{3.15}$$

и вектор

$$\mathbf{v}^2 = \boldsymbol{\omega}\mathbf{v}_0^2\ , \tag{3.16}$$

где $\boldsymbol{\omega}$ и $\mathbf{v}_0^2$ определяются, соответственно, формулами (2.25) и (2.58а).

Вектор (3.16), зависящий от угла φ поворота $\boldsymbol{\omega}$, образует минимальный угол $\boldsymbol{\Gamma}_2 \hat{\ } \mathbf{v}^2$ с вектором (3.14), если максимально скалярное произведение

$$\begin{aligned}(\mathbf{v}^2, \boldsymbol{\Gamma}_2) &= (\mathbf{v}^2, (\boldsymbol{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)\mathbf{e}_3^\gamma + [\mathbf{e}_3^\gamma, [\boldsymbol{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]]) = \\ &= (\mathbf{v}^2, \mathbf{e}_3^\gamma)(\boldsymbol{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma) + (\mathbf{v}^2, [\mathbf{e}_3^\gamma, [\boldsymbol{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]])\ .\end{aligned} \tag{3.17}$$

Первое слагаемое в правой части последнего равенства от φ не зависит, так как $(\mathbf{v}^2, \mathbf{e}_3^\gamma) = (\boldsymbol{\omega}\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma) = (\mathbf{v}_0^2, \boldsymbol{\omega}^* \mathbf{e}_3^\gamma) = (\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)$, а второе максимально, если угол между векторами $\mathbf{v}^2$ и $[\mathbf{e}_3^\gamma, [\boldsymbol{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]]$ равен нулю или (то же самое) если вектор $\mathbf{v}^2$ лежит в плоскости векторов $\boldsymbol{\Gamma}_2$ и $\mathbf{e}_3^\gamma$. Очевидно, что вектор $\mathbf{v}^2$ можно всегда совместить с плоскостью этих векторов за счет поворота вектора $\mathbf{v}_0^2$ вокруг оси $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_3^\gamma$ на подходящий угол (обозначим его φ_2). Угол φ_2 определяется уравнениями

$$\sin\varphi_2 = B\Big/\sqrt{A^2+B^2}\,, \quad \cos\varphi_2 = A\Big/\sqrt{A^2+B^2}\,, \tag{3.18}$$

следующими из условий максимума

$$d(\mathbf{v}^2, \mathbf{\Gamma}_2)\,/\,d\varphi = -A\sin\varphi + B\cos\varphi = 0\,,$$

$$d^2(\mathbf{v}^2, \mathbf{\Gamma}_2)\,/\,d\varphi^2 = -A\cos\varphi - B\sin\varphi < 0$$

скалярного произведения (3.17), зависимость которого от φ выражается в явном виде формулой

$$(\mathbf{v}^2, \mathbf{\Gamma}_2) = (\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)(\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma) + A\cos\varphi + B\sin\varphi\,, \tag{3.19}$$

где

$$A = (\mathbf{v}_0^2, [\mathbf{e}_3^\gamma, [\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]]), \quad B = (\mathbf{v}_0^2, [\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]);$$

$$A^2 + B^2 = |[\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma]|^2\,|[\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]|^2 = [1-(\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)^2][1-(\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)^2]\,. \tag{3.20}$$

Максимум скалярного произведения (3.17) достигается при $\varphi = \varphi_2 + 2\pi n$, где n – целое число. Полагая поэтому $\varphi = \varphi_2 + 2\pi n$ в (3.19) и учитывая (3.18), (3.20), будем иметь

$$(\mathbf{v}^2, \mathbf{\Gamma}_2)_{\max} = (\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)(\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma) + \sqrt{[1-(\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)^2][1-(\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)^2]}\,. \tag{3.21}$$

Правая часть в (3.21) не равна единице; значит, отличен от нуля и минимальный угол между векторами (3.16) и (3.13). Следует, однако, заметить, что скалярное произведение $(\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)$ есть функция собственных значений тензора Бейна и параметров $\eta = \pm 1$, $s = \pm 1$:

$$(\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma) = -s\eta\sqrt{(E_1^2-1)\big/(E_1^2-E_3^2)} \tag{3.22а}$$

(см. формулы (2.58а), (3.9), (2.52)), а собственные значения есть функции независимых переменных κ и τ (см. (3.10)), так что

$$(\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma) = -(s\eta/\kappa)\sqrt{(2\kappa^2-1)\big/(2-\tau^2)}\,. \tag{3.22б}$$

Если выбор переменных κ, τ и параметров η, s при заданном $\mathbf{X}_2$ подчинить требованиям:

$$m_{23}^2\,/\,M_2 = (2-\kappa^{-2})/(2-\tau^2)\,, \tag{3.23а}$$

$$s\eta = -\,m_{23}\,/\,|\,m_{23}|\,, \tag{3.23б}$$

где M_2 определяется формулой (3.15), – требованиям, которые следуют из условия

$$(\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma) = (\mathbf{v}_0^2,\ \mathbf{e}_3^\gamma) \tag{3.24}$$

и равенства $(\mathbf{\Gamma}_2\ ,\ \mathbf{e}_3^\gamma) = m_{23}/\sqrt{M_2}$ (см. формулы (3.14) и (3.22б)), то $(\mathbf{v}^2, \mathbf{\Gamma}_2)_{max} = 1$ и вектор $\mathbf{v}^2$ будет совпадать по направлению с вектором $\mathbf{X}_2$.

Итак, поворот $\boldsymbol{\omega}$ базиса $\mathbf{v}_0^1$, $\mathbf{v}_0^2$, $\mathbf{v}_0^3$ на угол $\varphi = \varphi_2 + 2\pi n$ вокруг оси $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_3^\gamma$ фиксирует ориентацию его:

$$\mathbf{v}^1|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n} = (|[\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma]|/|[\mathbf{v}_0^2,\ \mathbf{e}_3]|)\{[(\mathbf{v}_{30}, \mathbf{e}_3)/|[\mathbf{v}_{30}, \mathbf{v}_{10}]|]\,\mathbf{\Gamma}^1 -$$

$$-(\mathbf{v}_0^1, \mathbf{e}_3)(\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3)\mathbf{\Gamma}^2\} + (\mathbf{v}_0^1, \mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3^\gamma\ , \tag{3.25а}$$

$$\mathbf{v}^2|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n} = |[\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3]||[\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma]|\,\mathbf{\Gamma}^2 + (\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3^\gamma\ , \tag{3.25б}$$

$$\mathbf{v}^3|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n} = (|[\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma]|/|[\mathbf{v}_0^2,\ \mathbf{e}_3]|)\{-[(\mathbf{v}_{10}, \mathbf{e}_3)/|[\mathbf{v}_{30}, \mathbf{v}_{10}]|]\,\mathbf{\Gamma}^1 -$$

$$-(\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3)(\mathbf{v}_0^3, \mathbf{e}_3)\mathbf{\Gamma}^2\} + (\mathbf{v}_0^3, \mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3^\gamma\ , \tag{3.25в}$$

относительно векторов

$$\mathbf{\Gamma}^1 = [\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma]/|[\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma]|^2\ , \qquad \mathbf{\Gamma}^2 = [\mathbf{e}_3^\gamma, [\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma]]/|[\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma]|^2 \tag{3.26}$$

и $\mathbf{e}_3^\gamma$, выделенную условием $\mathbf{\Gamma}_2 \hat{\ } \mathbf{v}^2 = \min$, которое не накладывает дополнительных к (2.49) ограничений на собственные значения тензора Бейна.

Иначе обстоит дело с условием (3.24) и условием

$$\mathbf{\Gamma}_2 \hat{\ } \mathbf{v}^2 = 0\ , \tag{3.27}$$

выделяющими ориентировку базиса (3.25)[1]:

$$\mathbf{v}^1|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)=(\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)} = [(1 - E_3)/(|\mathbf{E}| - 1)]\{E_1\sigma_3\mathbf{\Gamma}^1 +$$

$$+ s\eta(\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma)[(\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma)\mathbf{\Gamma}^2 - \mathbf{e}_3^\gamma]\}\ , \tag{3.28а}$$

$$\mathbf{v}^2|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2, \mathbf{e}_3^\gamma)=(\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)} = \mathbf{\Gamma}_2\ , \tag{3.28б}$$

---

[1] При переходе от (3.25) к (3.28) используются формулы (3.26), (2.58), (2.57), (2.52), (2.54).

$$\mathbf{v}^3\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (v_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\mathbf{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = [\mathrm{E}_1(1-\mathrm{E}_3)/(|\mathbf{E}|-1)][(\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma)\times$$

$$\times(\mathrm{s}\eta\mathrm{E}_3\mathbf{\Gamma}^1 + \mathrm{E}_1\sigma_3\mathbf{\Gamma}^2) - \mathrm{E}_1\sigma_3\mathbf{e}_3^\gamma], \qquad (3.28\text{в})$$

так как направление вектора $\mathbf{v}^2$ совместимо с кристаллографическим направлением решетки γ (направлением вектора $\mathbf{X}_2$ в данном случае), если между собственными значениями тензора Бейна или между переменными κ и τ, что то же самое в силу (3.10), существует связь, подчиняющаяся уравнению (3.23а).

Тройке векторов (3.28) соответствует (см. формулы (1.29)) тройка векторов

$$\mathbf{v}_1\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (v_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\mathbf{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = -\mathrm{E}_1\sigma_3\mathbf{\Gamma}^1 +$$

$$+\,\mathrm{s}\eta\mathrm{E}_3(\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma)[(\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma)\mathbf{\Gamma}^2 - \mathbf{e}_3^\gamma], \qquad (3.29\text{а})$$

$$\mathbf{v}_2\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (v_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\mathbf{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = \mathbf{\Gamma}_2, \qquad (3.29\text{б})$$

$$\mathbf{v}_3\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (v_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\mathbf{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = \mathrm{s}\eta\,\mathrm{E}_1^{-1}(\mathbf{\Gamma}^2,\ \mathbf{e}_3^\gamma)\mathbf{\Gamma}^1 -$$

$$-\,\sigma_3[(\mathbf{\Gamma}_2,\ \mathbf{e}_3^\gamma)\mathbf{\Gamma}^2 - \mathbf{e}_3^\gamma], \qquad (3.29\text{в})$$

определяющих ориентационные инварианты деформационного $\gamma \to \alpha$ преобразования, выделенного условием (3.24) при $\varphi = \varphi_2 + 2\pi n$.

Требование (3.23а) накладывает ограничения и на выбор вектора $\mathbf{X}_2$ (точнее, модуля его и целочисленной координаты m_{23} [1]), поскольку ограничена область изменения переменных κ и τ:

$$1 \le \tau < \sqrt{2}, \qquad (3.30\text{а})$$

$$1/\sqrt[3]{2\tau} < \kappa \le 1/\sqrt{\tau\sqrt{2}}\,. \qquad (3.30\text{б})$$

Действительно, выразим κ в виде функции

$$\kappa = 1/\sqrt{2-(2-\tau^2)(m_{23}^2/M_2)} \qquad (3.31)$$

[1] Под целочисленными координатами вектора решетки γ здесь подразумеваются его координаты относительно базиса (3.2), измеренные в единицах $a_\gamma/2$ (см. формулу (3.3б)).

переменной τ, используя уравнение (3.23а). Исключая затем к в (3.30б) с помощью (3.31) и разрешая полученные неравенства относительно m_{23}^2 / M_2, придем к неравенствам

$$f_{min}(\tau) < m_{23}^2 / M_2 \le f_{max}(\tau), \tag{3.32}$$

где

$$f_{min}(\tau) = [2 - (2\tau)^{2/3}] / (2 - \tau^2) = 2^{2/3} / (\tau^{4/3} + 2^{1/3}\tau^{2/3} + 2^{2/3})\,; \tag{3.33а}$$

$$f_{max}(\tau) = \sqrt{2} / (\sqrt{2} + \tau) \tag{3.33б}$$

суть функции τ.

Функции (3.33) в интервале (3.30а) монотонно убывают (рис. 3.1), поэтому

$$1/3 < f_{min}(\tau) \le 2 - 2^{2/3}\,, \quad 1/2 < f_{max}(\tau) \le 2 - \sqrt{2}$$

и неравенства (3.32) могут удовлетворяться только при $m_{23}^2 / M_2 = f$, где f – рациональное число из интервала

$$1/3 < f < 2 - \sqrt{2}\,. \tag{3.34}$$

Ограничсния, выражаемые неравенствами (3.34), удобно детализировать, разбив интервал (3.34) значений f на части: $(1/3,\ 2 - 2^{2/3})$, $(2 - 2^{2/3},\ 1/2]$, $(1/2,\ 2 - \sqrt{2})$. Тогда можно утверждать (см. рис. 3.1), что неравенства (3.32) удовлетворяются в следующих случаях:

$$1/3 < f = m_{23}^2 / M_2 < 2 - 2^{2/3}\,, \tag{3.35а}$$

$$\tau''_2 < \tau < \sqrt{2}\,, \tag{3.35б}$$

$$2 - 2^{2/3} < f = m_{23}^2 / M_2 \le 1/2\,, \tag{3.36а}$$

$$1 \le \tau < \sqrt{2}\,, \tag{3.36б}$$

$$1/2 < f = m_{23}^2 / M_2 < 2 - \sqrt{2}\,, \tag{3.37а}$$

$$1 \le \tau \le \tau'_2\,, \tag{3.37б}$$

где

$$\tau''_2 = \sqrt{2 + \left[\left(\sqrt{(4/f) - 3} - 3\right)/f\right]}\ ;\ \tau'_2 = \sqrt{2}(1 - f)/f.$$

Неравенства (3.35) – (3.37) позволяют осуществлять отбор векторов решетки γ, отвечающих условию (3.27), и выделять интервалы допустимых значений переменной τ. Результаты такого отбора для $M_2 = 2, 4, \dots, 74$ представлены в табл. 3.2.

При пользовании табл. 3.2 следует иметь в виду, что радиус-векторы каждого из семейств $a_\gamma < m_{21}\ m_{22}\ m_{23} >_\gamma /2$, приведенных в единицах a_γ, имеют минимальную длину в направлениях $< m_{21}\ m_{22}\ m_{23} >_\gamma / \sqrt{M_2}$ и фиксированную (с точностью до знака) координату $(\mathbf{X}_2, \mathbf{e}_3^\gamma) = a_\gamma m_{23}/2$, поэтому позиция числа m_{23}, которое подчеркнуто снизу в обозначениях семейств направлений, должна оставаться неизменной при перестановках чисел m_{21}, m_{22}, m_{23}. В последней колонке таблицы приводятся формулы, выражающие к как функцию τ для каждого из конкретных значений отношения $f = m_{23}^2 / M_2$.

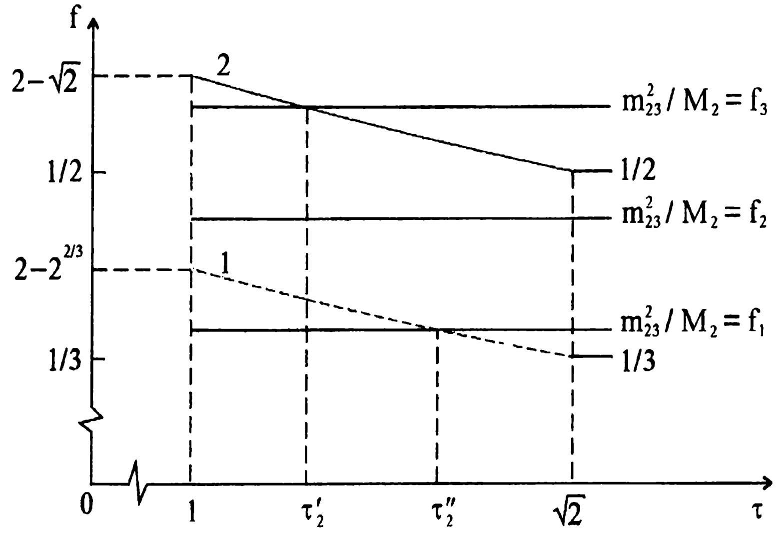

Рис. 3.1. Взаимное расположение кривых:
$f = f_{min}(\tau)$ – кривая 1; $f = f_{max}(\tau)$ – кривая 2 и прямых $m_{23}^2 / M_2 = f_1, f_2, f_3$;
f_1, f_2, f_3 – постоянные, значения которых берутся из интервалов
$1/3 < f_1 < 2 - 2^{2/3}$, $2 - 2^{2/3} < f_2 \le 1/2$, $1/2 < f_3 < 2 - \sqrt{2}$

Таблица 3.2

Векторы решетки γ, совместимые по направлению с вектором v^2 при M_2 из интервала [2, 74]

N_{KC}	M_2	$\lvert m_{23}\rvert$	$\dfrac{\langle m_{21}\, m_{22}\, \underline{m_{23}} \rangle_\gamma}{2}$	Допустимые значения τ	$\kappa(\tau,\ m_{23}^2 / M_2)$
1	2	1	$\langle 0\,1\,\underline{1}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{2/(2+\tau^2)}$
11	22	3	$\langle 2\,3\,\underline{3}\rangle_\gamma/2$	$\sqrt{2(11\sqrt{61}-72)/3}/3 < \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{22/(26+9\tau^2)}$
13	26	3	$\langle 1\,4\,\underline{3}\rangle_\gamma/2$	$\sqrt{2(13\sqrt{77}-90)/3}/3 < \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{26/(34+9\tau^2)}$
16	34	4	$\langle 3\,3\,\underline{4}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{17/[2(9+4\tau^2)]}$
17	36	4	$\langle 2\,4\,\underline{4}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{9/(10+4\tau^2)}$
20	42	4	$\langle 1\,5\,\underline{4}\rangle_\gamma/2$	$\sqrt{21\sqrt{30}-94}/4 < \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{21/[2(13+4\tau^2)]}$
24	50	5	$\langle 3\,4\,\underline{5}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{2/(2+\tau^2)}$
26	54	5	$\langle 2\,5\,\underline{5}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{54/(58+25\tau^2)}$
29	62	5	$\langle 1\,6\,\underline{5}\rangle_\gamma/2$	$\sqrt{2(31\sqrt{173}-340)/5}/5 < \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{62/(74+25\tau^2)}$
		6	$\langle 1\,5\,\underline{6}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau \le 13\sqrt{2}/18$	$\sqrt{31/[2(13+9\tau^2)]}$
31	66	5	$\langle 4\,5\,\underline{5}\rangle_\gamma/2$	$\sqrt{2(99\sqrt{21}-370)/5}/5 < \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{66/(82+25\tau^2)}$
32	68	6	$\langle 4\,4\,\underline{6}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau \le 8\sqrt{2}/9$	$\sqrt{17/(16+9\tau^2)}$
33	70	5	$\langle 3\,6\,\underline{5}\rangle_\gamma/2$	$\sqrt{2(\sqrt{205}-80)}/5 < \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{14/(18+5\tau^2)}$
		6	$\langle 3\,5\,\underline{6}\rangle_\gamma/2$	$1 \le \tau \le 17\sqrt{2}/18$	$\sqrt{35/[2(17+9\tau^2)]}$
35	74	5	$\langle 0\,7\,\underline{5}\rangle_\gamma/2$	$\sqrt{2(37\sqrt{221}-430)/5}/5 < \tau < \sqrt{2}$	$\sqrt{74/(98+25\tau^2)}$

Переходя наконец в формулах (3.28), (3.29) непосредственно к базису (3.2) и используя формулы (3.10), (2.54), (2.57), (3.11), будем иметь:

$$\mathbf{v}^1\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\boldsymbol{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = |\mathbf{v}_0^1|\sum_{i=1}^{3}\cos\alpha_i^1\mathbf{e}_i^\gamma \ , \tag{3.38а}$$

$$\mathbf{v}^2\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\boldsymbol{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = \sum_{i=1}^{3}(m_{2i}/\sqrt{M_2})\mathbf{e}_i^\gamma \ , \tag{3.38б}$$

$$\mathbf{v}^3\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\boldsymbol{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = |\mathbf{v}_0^3|\sum_{i=1}^{3}\cos\alpha_i^3\mathbf{e}_i^\gamma \ , \tag{3.38в}$$

$$\mathbf{v}_1\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\boldsymbol{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = \sum_{i=1}^{3}\cos\beta_{1i}\mathbf{e}_i^\gamma \ , \tag{3.39а}$$

$$\mathbf{v}_2\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\boldsymbol{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = \mathbf{v}^2\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\boldsymbol{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} \ , \tag{3.39б}$$

$$\mathbf{v}_3\big|_{\varphi=\varphi_2+2\pi n,\ (\mathbf{v}_0^2,\mathbf{e}_3^\gamma)=(\boldsymbol{\Gamma}_2,\mathbf{e}_3^\gamma)} = \sum_{i=1}^{3}\cos\beta_{3i}\mathbf{e}_i^\gamma \ . \tag{3.39в}$$

Здесь

$$|\mathbf{v}_0^1| = |\mathbf{v}_0^3| = \kappa^{-1}\sqrt{2}(1-f)/(f\tau\kappa^{-1}-\sigma^2) \ , \tag{3.40}$$

где

$$\sigma = \sqrt{f^2(2-\tau^2)-4f+2} \ ; \tag{3.41}$$

κ как функция τ и $f = m_{23}^2/M_2$ определяется формулой (3.31).

Направляющие косинусы в (3.38а), (3.38в), (3.39а), (3.39в) определяются формулами:

$$\cos\alpha_1^1 = \frac{1}{(1-f)\sqrt{2M_2}}(s\eta f m_{21}\kappa^{-1} + m_{22}\sigma) \ , \tag{3.42а}$$

$$\cos\alpha_2^1 = \frac{1}{(1-f)\sqrt{2M_2}}(s\eta f m_{22}\kappa^{-1} - m_{21}\sigma) \ , \tag{3.42б}$$

$$\cos\alpha_3^1 = \kappa^{-1}\sqrt{f/2} \ ; \tag{3.42в}$$

$$\cos\alpha_1^3 = -\frac{\kappa|m_{23}|(\tau m_{22} + s\eta m_{21}\sigma)}{(1-f)M_2} \ , \tag{3.43а}$$

$$\cos\alpha_2^3 = \frac{\kappa\,|\,m_{23}\,|(\tau m_{21} - s\eta m_{22}\sigma)}{(1-f)M_2}, \tag{3.43б}$$

$$\cos\alpha_3^3 = -\sigma\kappa\ ; \tag{3.43в}$$

$$\cos\beta_{11} = \frac{\kappa(s\eta m_{21} f\,\tau - m_{22}\sigma)}{(1-f)\sqrt{M_2}}, \tag{3.44а}$$

$$\cos\beta_{12} = \frac{\kappa(s\eta m_{22} f\,\tau + m_{21}\sigma)}{(1-f)\sqrt{M_2}}, \tag{3.44б}$$

$$\cos\beta_{13} = \kappa\,\tau\sqrt{f}\ ; \tag{3.44в}$$

$$\cos\beta_{31} = -\frac{|\,m_{23}\,|(m_{22}\kappa^{-1} - s\eta m_{21}\sigma)}{(1-f)M_2\sqrt{2}}, \tag{3.45а}$$

$$\cos\beta_{32} = \frac{|\,m_{23}\,|(m_{21}\kappa^{-1} + s\eta m_{22}\sigma)}{(1-f)M_2\sqrt{2}}, \tag{3.45б}$$

$$\cos\beta_{33} = \sigma/\sqrt{2}\ . \tag{3.45в}$$

Формулы (3.38) – (3.45) позволяют перейти в (1.40) к базису (3.2) и выразить тензор **L** в виде

$$\mathbf{L} = \sum_{k,j=1}^{3} \widetilde{L}_{kj}\mathbf{e}_k^{\gamma}\cdot\mathbf{e}_j^{\gamma}, \tag{3.46}$$

где

$$\widetilde{L}_{kj} = (\kappa^2 m_{2k} m_{2j}/M_2)[2(\delta_{1j}+\delta_{2j})+\tau^2\delta_{3j}] +$$
$$+|\,\mathbf{v}_0^1\,|(\cos\alpha_k^1\cos\beta_{1j} + 2\kappa^3\tau\cos\alpha_k^3\cos\beta_{3j}) \tag{3.47}$$

суть матричные элементы тензора **L** относительно базиса (3.2), а δ_{1j}, δ_{2j}, δ_{3j} – символы Кронекера.

3.4. Базисные векторы решетки ξ^3

Предположим, что целочисленные координаты вектора $\mathbf{X}_2$ удовлетворяют какому-либо из неравенств (3.35а), (3.36а), (3.37а), а переменные κ, τ и параметры s, η отвечают требованиям (3.23). Тогда ориентация базиса $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3$ будет задаваться векторами (3.28) и можно всегда обеспечить выполнимость равенства

$$\xi_2 = \mathbf{X}_2\,, \tag{3.48}$$

полагая

$$\xi_{22} = |\mathbf{X}_2|\,. \tag{3.49}$$

В результате вектор ξ_2 решетки ξ^3 отождествляется с вектором решетки γ. Последний имеет минимальную длину в направлении $\mathbf{\Gamma}_2$ [1], поэтому периоды решеток ξ^3 и γ в направлении $\mathbf{\Gamma}_2$ совпадают.

Вопрос о совместимости векторов ξ_1, ξ_3 (см. (3.12а), (3.12в)) с векторами решетки γ следует решать, используя ориентировку (3.28) базиса $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3$, уже выделенную условием совместимости векторов ξ_2 и $\mathbf{X}_2$.

Подстановка (3.28) в (3.12а) с учетом тождества $\mathbf{\Gamma}_2 \equiv (\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)\,\mathbf{e}_3^\gamma + [\mathbf{e}_3^\gamma, [\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]]$ и формул (3.49), (2.54), (3.10) позволяет получить

$$\xi_1 = \frac{s\eta k}{\kappa(2\kappa^2-1)}\sqrt{\frac{1-2\kappa^4\tau^2}{2-\tau^2}}\,|\mathbf{X}_2|\,\mathbf{\Gamma}^1 + \Bigg[g\,|[\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma]|^2 + \\ + \frac{k}{2\kappa^2-1}(\mathbf{\Gamma}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)^2\Bigg]|\mathbf{X}_2|\,\mathbf{\Gamma}^2 + (\mathbf{X}_2, \mathbf{e}_3^\gamma)\left(g - \frac{k}{2\kappa^2-1}\right)\mathbf{e}_3^\gamma\,, \tag{3.50}$$

где произведение $s\eta$ определяется формулой (3.23б), κ как функция переменной τ – формулой (3.31) и вводится параметр

$$g = \xi_{12}/|\mathbf{X}_2|\,, \tag{3.51}$$

принимающий значения из интервала

$$-1/2 \le g \le 1/2 \tag{3.52}$$

(см. (3.49) и неравенства (1.62)).

Формула (3.50) определяет вектор ξ_1 в виде линейной комбинации векторов (3.26) и $\mathbf{e}_3^\gamma$, а векторы решетки γ задаются (см. формулу (3.3б)) относительно базиса (3.2). Учитывая это, перепишем формулу (3.50) в виде

$$\xi_1 = a_\gamma(\tilde{\xi}_{11}\mathbf{e}_1^\gamma + \tilde{\xi}_{12}\mathbf{e}_2^\gamma + \tilde{\xi}_{13}\mathbf{e}_3^\gamma)/2\,, \tag{3.53}$$

переходя к базису (3.2), где

$$\tilde{\xi}_{11} = m_{21}(g + a) + s\eta k b c m_{22}\,, \tag{3.54а}$$

[1] См. пояснения к табл. 3.2.

$$\tilde{\xi}_{12} = m_{22}(g + a) - s\eta kbcm_{21}\,, \tag{3.54б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = m_{23}\left[k + g - \frac{2kM_2}{(2-\tau^2)m_{23}^2}\right], \tag{3.54в}$$

$$a = \frac{k}{M_2 - m_{23}^2}\left[\frac{2M_2}{2-\tau^2} - m_{23}^2\right], \tag{3.55а}$$

$$b = \frac{\sqrt{2(M_2 - m_{23}^2)^2 - m_{23}^4\tau^2}}{M_2 - m_{23}^2}\,, \tag{3.55б}$$

$$c = \frac{\sqrt{M_2[2M_2 - (2-\tau^2)m_{23}^2]}}{(2-\tau^2)m_{23}^2}\,, \tag{3.55в}$$

$$s\eta = -\,m_{23}/|m_{23}|\,. \tag{3.55г}$$

Модуль вектора ξ_1 будет выражаться тогда формулой

$$|\xi_1| = a_\gamma\sqrt{\tilde{\xi}_1}\,/2\,, \tag{3.56а}$$

где

$$\tilde{\xi}_1 = \tilde{\xi}_{11}^2 + \tilde{\xi}_{12}^2 + \tilde{\xi}_{13}^2 = M_2(g^2 + 2k^2c^2)\,. \tag{3.56б}$$

Базисный вектор ξ_3 решетки ξ^3 определяется (см. (3.12в)) в виде линейной комбинации $\xi_3 = \xi_3^1\,\xi_1 + \xi_3^2\,\xi_2 + \xi_3^3\,\nu_3$ векторов ξ_1, ξ_2, ν_3. Первый из них задается относительно базиса (3.2) формулой (3.53), второй отождествляется с вектором $\mathbf{X}_2$ (см. (3.48) и (3.13)), третий определяется формулой

$$\nu_3 = \omega\nu_{30}\Big|_{\varphi=\varphi+2\pi n,\ (\nu_0^2,\, e_3^\gamma) = (\Gamma_2,\, e_3^\gamma)} = \frac{s\eta}{\sqrt{2}\,kcM_2}\sum_{i,s,r=1}^{3}\delta_{isr}\tilde{\xi}_{1s}m_{2r}e_i^\gamma\,, \tag{3.57}$$

где δ_{isr} – символ Леви-Чивиты. Учитывая это, будем иметь

$$\xi_3 = \frac{a_\gamma}{2}\sum_{i=1}^{3}\tilde{\xi}_{3i}e_i^\gamma\,, \tag{3.58а}$$

где

$$\tilde{\xi}_{3i} = \xi_3^1\tilde{\xi}_{1i} + \xi_3^2\,m_{2i} + \frac{s\eta\tilde{\xi}_3^3}{\sqrt{2}\,kcM_2}\sum_{s,r=1}^{3}\delta_{isr}\tilde{\xi}_{1s}m_{2r}\,,\quad \tilde{\xi}_3^3 \equiv 2\xi_3^3/a_\gamma\,. \tag{3.58б}$$

Формулы (3.57) и (3.58) выражают вектор $\mathbf{v}_3$, направленный вдоль нормали к ориентационно неизменной плоскости Π_3, и вектор $\boldsymbol{\xi}_3$ в виде, удобном для сравнения с векторами решетки γ.

3.5. Условия совместимости вектора ξ_1 с вектором решетки γ

Базисный вектор ξ_1 решетки ξ^3 (см. формулу (3.53)) будет совпадать с вектором решетки γ (см. формулы (3.3б), (3.5)), если

$$\tilde{\xi}_{11} = m_{11},\ \tilde{\xi}_{12} = m_{12},\ \tilde{\xi}_{13} = m_{13}\ ; \qquad (3.59а)$$

$$\tilde{\xi}_1 = M_1\ , \qquad (3.59б)$$

где m_{11}, m_{12}, m_{13} – целые числа, отвечающие тем же требованиям, что и числа m_1, m_2, m_3 в (3.5); $M_1 = m_{11}^2 + m_{12}^2 + m_{13}^2$ – четное натуральное число.

Координаты (3.54) вектора (3.53), будучи функциями непрерывно изменяющихся переменных g (см. (3.51)) и τ (см. (3.55)), могут принимать целочисленные значения только при каких-то выделенных значениях переменных g и τ, и нужно установить, при каких именно. Для этого обратимся к формулам (3.54). Используя их, найдем

$$m_{21}\tilde{\xi}_{11} + m_{22}\tilde{\xi}_{12} + m_{23}\tilde{\xi}_{13} = gM_2\ , \qquad (3.60)$$

$$m_{22}\tilde{\xi}_{11} - m_{21}\tilde{\xi}_{12} = s\eta kbc(m_{21}^2 + m_{22}^2)\ , \qquad (3.61а)$$

$$m_{23}\tilde{\xi}_{13} - k\,m_{23}^2 = g\,m_{23}^2 - [2kM_2/(2-\tau^2)]\ . \qquad (3.61б)$$

Исключая теперь g в (3.61б) с помощью (3.60), получим

$$\frac{2kM_2^2}{(2-\tau^2)m_{23}} = m_{23}(m_{21}\tilde{\xi}_{11} + m_{22}\tilde{\xi}_{12} + m_{23}\tilde{\xi}_{13}) - M_2(\tilde{\xi}_{13} - km_{23})\ , \qquad (3.62)$$

а (3.61а) перепишем в виде

$$s\eta k\beta c = m_{22}\tilde{\xi}_{11} - m_{21}\tilde{\xi}_{12}\ , \qquad (3.63)$$

где

$$\beta = b(m_{21}^2 + m_{22}^2) = \sqrt{2(M_2 - m_{23}^2)^2 - m_{23}^4\tau^2}\ . \qquad (3.64)$$

Рассмотрим по отдельности случаи $g = 0$ и $g \neq 0$.

1. Пусть $g = 0$.

Тогда равенство (3.62) можно выразить в виде

$$\tilde{\xi}_{13} = km_{23} - \frac{2kM_2}{(2-\tau^2)m_{23}}. \qquad (3.65)$$

Правая часть в (3.65) будет целым числом, если

$$\frac{2|k|M_2}{(2-\tau^2)|m_{23}|} = N_\tau, \qquad (3.66)$$

где N_τ – натуральное число, границы изменения которого определяются неравенствами:

$$N_\tau > \frac{|k\,m_{23}|}{2(3f-1)}\left(3f + \sqrt{4f-3f^2}\right), \qquad (3.67а)$$

если f принадлежит интервалу (3.35а);

$$N_\tau \geq 2|km_{23}|/f, \qquad (3.67б)$$

если f принадлежит интервалу (3.36а);

$$2|km_{23}|/f \leq N_\tau \leq f|km_{23}|/(2f-1), \qquad (3.67в)$$

если f принадлежит интервалу (3.37а).

В этом нетрудно убедиться, выражая τ из (3.66), что дает

$$\tau = \sqrt{2\left(1 - \frac{|k|M_2}{|m_{23}|N_\tau}\right)},$$

и используя неравенства (3.35) – (3.37).

Условие (3.66) позволяет выразить координату $\tilde{\xi}_{13}$ через натуральную переменную N_τ:

$$\tilde{\xi}_{13} = s\,\eta\,\eta_k(N_\tau - |km_{23}|), \qquad (3.68)$$

где

$$\eta_k = k/|k|. \qquad (3.69)$$

Разность $N_\tau - |km_{23}| > 0$ при любых значениях N_τ, удовлетворяющих неравенствам (3.67). Учитывая это, перейдем к новой натуральной переменной:

$$N_{13} = N_\tau - |km_{23}|. \qquad (3.70)$$

Тогда будем иметь

$$\tau = \sqrt{2\left[1 - \frac{|k|M_2}{|m_{23}|(N_{13} + |k\,m_{23}|)}\right]} . \qquad (3.71)$$

Область допустимых значений переменной N_{13} (3.70) устанавливается неравенствами:

$$N_{13} > 2|k\,m_{23}|F_1(f) , \qquad (3.72а)$$

если f принадлежит интервалу (3.35а),

$$N_{13} \geq 2|k\,m_{23}|F_2(f) , \qquad (3.72б)$$

если f принадлежит интервалу (3.36а),

$$2|k\,m_{23}|F_2(f) \leq N_{13} \leq 2|k\,m_{23}|F_3(f) , \qquad (3.72в)$$

если f принадлежит интервалу (3.37а), – неравенствами, которые следуют из неравенств (3.67), где

$$F_1(f) = \frac{2 - 3f + \sqrt{4f - 3f^2}}{4(3f - 1)} , \qquad (3.73а)$$

$$F_2(f) = [(2/f) - 1]/2 , \qquad (3.73б)$$

$$F_3(f) = \frac{1 - f}{2(2f - 1)} \qquad (3.73в)$$

суть функции переменой f.

Поведение функций (3.73) в зависимости от f иллюстрируется графиками на рис. 3.2. Для удобства сравнения на рис. 3.2 представлены также графики функции

$$F(f) = (1 - f)/f , \qquad (3.74)$$

используемой ниже.

Функции $F_1(f)$, $F_2(f)$, $F_3(f)$ и $F(f)$ имеют следующие значения на границах интервалов (3.35а), (3.36а), (3.37а):

$$F_1(f)\big|_{f\to 1/3} = +\infty , \quad F(f)\big|_{f\to 1/3} = 2 ,$$

$$F_1(f)\big|_{f\to 2-2^{2/3}} = [3 - 2^{4/3} + \sqrt{(2^{1/3} - 1)(3 - 2^{1/3})}]/(5 \cdot 2^{4/3} - 12) ,$$

$$F(f)\big|_{f\to 2-2^{2/3}} = (2^{1/3} - 1)/2^{2/3} ,$$

$$F_2(f)\big|_{f\to 2-2^{2/3}} = 2^{-4/3}/(1-2^{-1/3}) \ ,$$

$$F_2(f)\big|_{f=1/2} = 3/2 \ , \ \ F_3(f)\big|_{f\to 1/2} = +\infty \ , \ \ F(f)\big|_{f=1/2} = 1 \ ,$$

$$F_2(f)\big|_{f\to 2-\sqrt{2}} = F_3(f)\big|_{f\to 2-\sqrt{2}} = (\sqrt{2}+1)/2 \ , \ \ F(f)\big|_{f\to 2-\sqrt{2}} = 1/\sqrt{2} \ .$$

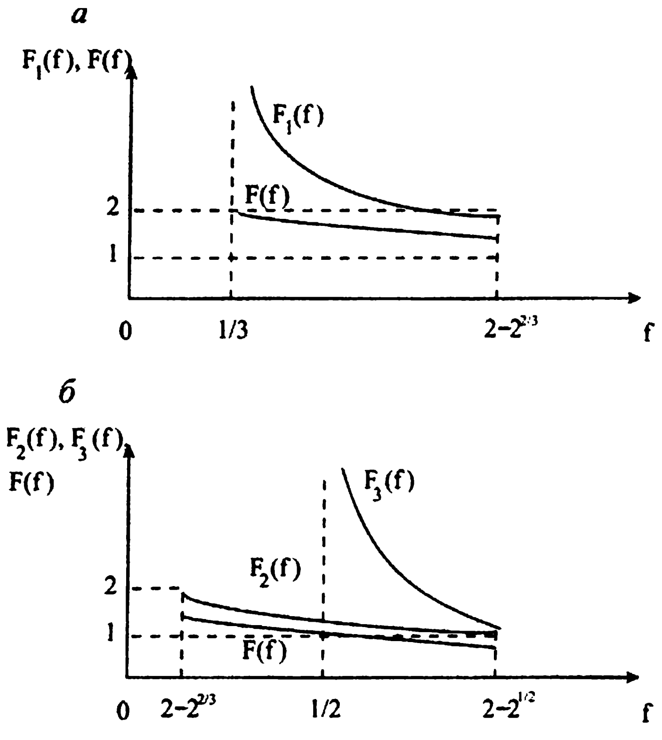

Рис. 3.2. Поведение функций $F_1(f)$, $F_2(f)$, $F_3(f)$ и $F(f)$ в зависимости от f: *а* – при f из интервала (3.35а); *б* – при f из интервалов (3.36а), (3.37а)

Формула (3.71) позволяет исключить непрерывную переменную τ в формулах (3.55) и выразить $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$, $\tilde{\xi}_1$ (см. формулы (3.54а), (3.54б), (3.68), (3.62), (3.56б)) через натуральную переменную N_{13} :

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k (m_{21}|m_{23}|N_{13} + s\eta\,|k|\beta c m_{22})/(M_2 - m_{23}^2)\,, \qquad (3.75а)$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k (m_{22}|m_{23}|N_{13} - s\eta\,|k|\beta c m_{21})/(M_2 - m_{23}^2)\,, \qquad (3.75б)$$

$$\tilde{\xi}_{13} = \eta_k s\eta\, N_{13}\,, \qquad (3.75в)$$

$$\tilde{\xi}_{1} = M_2 N_{13}(N_{13} + |k m_{23}|)/\, m_{23}^2\,, \qquad (3.76)$$

где η_k и $s\eta$ определяются формулами (3.69) и (3.55г); область допустимых значений натуральной переменной N_{13} определяется неравенствами (3.72);

$$|k|\beta c = \frac{1}{|m_{23}|}\sqrt{M_2 N_{13}[N_{13}(M_2 - 2m_{23}^2) + |k\, m_{23}|\,(M_2 - m_{23}^2)]}\,. \qquad (3.77)$$

Формулы (3.75) – (3.77) следует дополнить равенством

$$|k|\beta c = s\eta\eta_k (m_{22}\tilde{\xi}_{11} - m_{21}\tilde{\xi}_{12}) \qquad (3.78)$$

(см. (3.63)), выражающим требование целочисленности произведения $|k|\beta c$ при целочисленных $\tilde{\xi}_{11}$ и $\tilde{\xi}_{12}$.

2. Пусть $g \neq 0$.

Тогда правая часть в (3.60) и левая часть в (3.62) будут иметь целочисленные значения, если

$$|g| = n_g/M_2\,, \qquad (3.79а)$$

$$\frac{2|k|M_2^2}{(2-\tau^2)|m_{23}|} = n_\tau\,, \qquad (3.79б)$$

где n_g и n_τ – натуральные числа.

Формулы (3.79) позволяют выразить g и τ через переменные и параметры, принимающие только целочисленые значения:

$$g = \eta_g\, n_g / M_2\,, \qquad (3.80)$$

где

$$\eta_g = \pm 1\;; \qquad (3.81)$$

$$\tau = \sqrt{2\left(1 - \frac{|k|M_2^2}{n_\tau |m_{23}|}\right)}\,, \qquad (3.82)$$

и перейти к целочисленным – η_g, η_k и натуральным – n_g, n_τ переменным в формулах (3.54) – (3.56), где η_k определяется формулой (3.69). Значения натуральной переменной n_g ограничены снизу и сверху:

$$1 \le n_g \le M_2 / 2 , \tag{3.83}$$

в силу неравенств (3.52), а область допустимых значений натуральной переменной n_τ зависит от $f = m_{23}^2 / M_2$ и определяется неравенствами:

$$n_\tau > \frac{M_2 |k\, m_{23}|}{2(3f-1)} \left(3f + \sqrt{4f - 3f^2}\right), \tag{3.84а}$$

если f принадлежит интервалу (3.35а);

$$n_\tau \ge 2M_2 |k\, m_{23}| / f , \tag{3.84б}$$

если f принадлежит интервалу (3.36а);

$$2M_2 |k\, m_{23}| / f \le n_\tau \le M_2 |k\, m_{23}| f / (2f-1) , \tag{3.84в}$$

если f принадлежит интервалу (3.37а). Неравенства (3.84) следуют из неравенств (3.35) – (3.37), разрешенных с учетом формулы (3.82) относительно n_τ.

Рассмотрим переход к целочисленным и натуральным переменным в формулах (3.54) – (3.56). Выразим переменную с в виде

$$c = \frac{1}{|k\, m_{23}| M_2 \sqrt{2}} \sqrt{n_\tau (n_\tau - |k\, m_{23}| M_2)} , \tag{3.85}$$

исключив τ в (3.55в) с помощью (3.82). Исключив затем g и с в (3.56б) с помощью (3.80) и (3.85), найдем

$$\tilde{\xi}_1 = \left\{ n_g^2 + [n_\tau (n_\tau - |k\, m_{23}| M_2) / m_{23}^2] \right\} / M_2 . \tag{3.86}$$

Целочисленные значения функции (3.86) можно ожидать, если $n_\tau = |\, m_{23}\,|\, n'_\tau$, где n'_τ – натуральное число. В противном случае множитель m_{23}^2 в знаменателе формулы $M_2 \tilde{\xi}_1 - n_g^2 = n_\tau (n_\tau - |k\, m_{23}| M_2) / m_{23}^2$, выражающей через n_τ разность $M_2 \tilde{\xi}_1 - n_g^2$, целочисленную при целочисленных $\tilde{\xi}_1$, не сократим, так как $n_\tau - |\, k\, m_{23}\,|\, M_2$ и m_{23} – взаимно простые при взаимно простых n_τ и m_{23}. Учитывая это, перейдем от переменной n_τ к переменной n'_τ, а затем к переменной n_{13}, полагая

$$n'_\tau = n_{13} + |k|M_2,$$

$$n_\tau = |m_{23}|(n_{13} + |k|M_2) \ . \tag{3.87}$$

Область допустимых значений натуральной пременной n_{13} определяется неравенствами:

$$n_{13} > 2M_2 |k| F_1(f) \ , \tag{3.88а}$$

если f принадлежит интервалу (3.35а);

$$n_{13} \ge 2M_2 |k| F_2(f) \ , \tag{3.88б}$$

если f принадлежит интервалу (3.36а);

$$2M_2 |k| F_2(f) \le n_{13} \le 2M_2 |k| F_3(f) \ , \tag{3.88в}$$

если f принадлежит интервалу (3.37а), где $F_1(f)$, $F_2(f)$ и $F_3(f)$ определяются формулами (3.73).

Неравенства (3.88) получаются из неравенств (3.84), если их разрешить относительно n_{13}, исключив предварительно n_τ с помощью (3.87).

Заметим также, что

$$n_{13} - \eta_k \eta_g n_g > 0 \tag{3.89}$$

при n_{13} и n_g, удовлетворяющих ограничениям (3.88), (3.83), поскольку

$$n_{13} - \eta_k \eta_g n_g > 2M_2\,|\,k\,|\,F_1(f) - \eta_k \eta_g n_g \ge M_2[4\,|\,k\,|\,F_1(f) - 1]/2 > 0 \ ,$$

если f принадлежит интервалу (3.35а), и

$$n_{13} - \eta_k \eta_g n_g \ge 2M_2\,|\,k\,|\,F_2(f) - \eta_k \eta_g n_g \ge M_2[4\,|\,k\,|\,F_2(f) - 1]/2 > 0 \ ,$$

если f принадлежит интервалам (3.36а), (3.37а).

Подстановка (3.87) в (3.82) приводит к формуле

$$\tau = \sqrt{2\left[1 - \frac{|k|M_2^2}{m_{23}^2(n_{13} + |k|M_2)}\right]} \ , \tag{3.90}$$

позволяющей выразить переменные (3.55а), (3.55б) в виде

$$a = \eta_k (m_{23}^2/M_2) n_{13} /(M_2 - m_{23}^2) \ , \tag{3.91а}$$

$$b = \sqrt{2M_2\left\{M_2 - 2m_{23}^2 + [|k| m_{23}^2 M_2/(n_{13} + |k|M_2)]\right\}}\Big/(M_2 - m_{23}^2) \ . \tag{3.91б}$$

Исключая теперь переменные g, a, b, c, τ в (3.54), (3.64) с помощью (3.80), (3.91), (3.85), (3.90) и переходя в (3.85), (3.86) от переменной n_τ к переменной n_{13}, будем иметь

$$\tilde{\xi}_{11} = \frac{\eta_k}{M_2}\left[-m_{21}\left(n_{13} - \eta_k \eta_g n_g\right) + \frac{M_2\left(m_{21} n_{13} + s\eta m_{22}|k|\beta c\right)}{M_2 - m_{23}^2}\right], \quad (3.92а)$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \frac{\eta_k}{M_2}\left[-m_{22}\left(n_{13} - \eta_k \eta_g n_g\right) + \frac{M_2\left(m_{22} n_{13} - s\eta m_{21}|k|\beta c\right)}{M_2 - m_{23}^2}\right], \quad (3.92б)$$

$$\tilde{\xi}_{13} = \eta_k s\eta |m_{23}|\left(n_{13} - \eta_k \eta_g n_g\right)/M_2\,, \quad (3.92в)$$

$$\tilde{\xi}_1 = |k| n_{13} + [(n_{13}^2 + n_g^2)/M_2]\,, \quad (3.93)$$

$$|k|\beta c = \eta_k s\eta (m_{22}\tilde{\xi}_{11} - m_{21}\tilde{\xi}_{12})\,, \quad (3.94)$$

$$|k|\beta c = \frac{1}{M_2}\sqrt{M_2 n_{13}[n_{13}(M_2 - 2m_{23}^2) + |k| M_2 (M_2 - m_{23}^2)]}\,, \quad (3.95)$$

где η_k, η_g, $s\eta$ определяются формулами (3.69), (3.81), (3.55г), а область изменения независимо задаваемых натуральных переменных n_g, n_{13} – неравенствами (3.83), (3.88), (3.89).

Заключительные замечания

Условия совместимости векторов ξ_2 и ξ_1, образующих базис решетки ξ^2 в плоскости Π_3, с векторами решетки γ (см. формулы (3.23), (3.49), (3.59)) устанавливают связь между координатами задаваемого вектора $\mathbf{X}_2$ и геометрическими характеристиками $\gamma \to \alpha$ преобразования (см. формулы (3.23а), (3.31), (3.32), табл. 3.2). Использование ее приводит к формулам (см. (3.75), (3.92)), которые, в отличие от формул (3.54), выражают координаты $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ вектора ξ_1 в виде функций натуральных переменных: переменной N_{13} при $g = 0$ (ортогональные $\xi_2 = \mathbf{X}_2$ и ξ_1) или переменных n_g, n_{13} при $g \neq 0$ (неортогональные $\xi_2 = \mathbf{X}_2$ и ξ_1).

Вместе с тем целочисленной функцией, принимающей целочисленные значения при любых значениях натуральных переменных, является лишь координата $\tilde{\xi}_{13}$ при $g = 0$ (см. формулу (3.75в)). Целочисленность же координаты $\tilde{\xi}_{13}$ при $g \neq 0$ (см. формулу (3.92в)), целочисленность координат $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ (см. формулы (3.75а), (3.75б), (3.92а), (3.92б)), требующая целочисленности произведения $|k|\beta c$ (см. формулы (3.77), (3.78), (3.94), (3.95)), и целочисленность суммы (3.56б), выражаемой формулами (3.76), (3.93) через натуральные переменные, если и могут иметь место, то только при выделенных значениях натуральных переменных. Значения эти подлежат определению в зависимости от задаваемых значений целочисленных координат вектора $\mathbf{X}_2$ (3.13) и целочисленного $k \neq 0$.

Целочисленные координаты m_{21}, m_{22}, m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ при заданном $|\mathbf{X}_2| = a_\gamma\sqrt{M_2}/2$, где $M_2 = 2, 4, 6, \ldots$, выбираются из множества решений m_1, m_2, m_3 систем уравнений (3.8) при $M = M_2$ и должны отвечать определенным требованиям. Одно из этих требований выражается неравенствами

$$1/3 < m_{23}^2 / M_2 < 2 - \sqrt{2}\ , \qquad (3.96)$$

которые следуют из условий совместимости вектора ξ_2 – инварианта деформационного $\gamma \to \alpha$ преобразования с вектором решетки γ – вектором $\mathbf{X}_2$. Выделенность координаты m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ обусловлена [1] в данном случае выбором направления $\mathbf{e}_3^\gamma = [0\,0\,1]_\gamma$ для оси бейновского сжатия – собственного вектора $\mathbf{e}_3$ тензора Бейна (см. формулы (3.1), (3.2)).

Неравенства (3.96) приводят к ограничениям

$$(\mathbf{X}_2 \hat{\ } \mathbf{e}_3^\gamma)_{min} < \mathbf{X}_2 \hat{\ } \mathbf{e}_3^\gamma < (\mathbf{X}_2 \hat{\ } \mathbf{e}_3^\gamma)_{max}$$

на взаимную ориентацию вектора $\mathbf{X}_2$ и оси бейновского сжатия (поскольку $(\mathbf{X}_2/|\mathbf{X}_2|,\ \mathbf{e}_3^\gamma) = \cos(\mathbf{X}_2 \hat{\ } \mathbf{e}_3^\gamma) = |m_{23}|/\sqrt{M_2}$), исключающим ортогональность инвариантного направления $\xi_2/|\xi_2| = \mathbf{X}_2/|\mathbf{X}_2|$ и оси бейновского сжатия, так как

$$(\mathbf{X}_2 \hat{\ } \mathbf{e}_3^\gamma)_{min} = (1/2)\arccos(3 - 2\sqrt{2}) \approx 40{,}06°,$$

$$(\mathbf{X}_2 \hat{\ } \mathbf{e}_3^\gamma)_{max} = (1/2)\arccos(-1/3) \approx 54{,}74°.$$

Другое требование выражается равенством

---

[1] В неравенства (3.96) входит та из координат вектора $\mathbf{X}_2$, позиция которой в обозначении $[m_{21}\ m_{22}\ m_{23}]_\gamma$ совпадает с позицией единицы в обозначении вектора $\mathbf{e}_3$, заданного относительно базиса (3.2), связанного с решеткой γ фазы.

$$|\mathbf{X}_2| = a_2\big|_{<m_{21}\ m_{22}\ m_{23}>_\gamma}, \qquad (3.97)$$

выделяющим векторы $\mathbf{X}_2$, длина которых совпадает с периодом $a_2\big|_{<m_{21}\ m_{22}\ m_{23}>_\gamma}$ решетки γ в направлении $< m_{21}\ m_{22}\ m_{23} >_\gamma$, так как в противном случае возможность совмещения двухмерной решетки ξ^2, построенной на векторах ξ_2, ξ_1 в плоскости Π_3, и двухмерной решетки (обозначим ее γ^2), которая образована узлами решетки γ, принадлежащими плоскости Π_3, исключается заведомо.

В случае нечетных m_{23}, где

$$\sqrt{M_2/3} < |m_{23}| < \sqrt{(2-\sqrt{2})M_2}, \qquad (3.98)$$

требованию (3.97) отвечают решения m_1, m_2, m_3 систем уравнений (3.8б), (3.8в) при $M = M_2$ (где $M_2 = 2M_2'$, M_2' – нечетное натуральное число), каждое из которых представляет собой тройку целых чисел различной четности, не имеющих общего нечетного множителя, отличного от единицы.

Аналогичным образом обстоит дело, если m_{23} – четное число, удовлетворяющее неравенствам (3.98) при заданном M_2, а m_{21}, m_{22} – нечетные. Требованию (3.97) отвечают тогда решения m_1, m_2, m_3 системы уравнений (3.8г) при $M = M_2$ (где $M_2 = 2M_2'$, M_2' – нечетное натуральное число), не имеющие общего нечетного множителя, отличного от единицы.

Если же все координаты m_{21}, m_{22}, m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ – числа четные, то их значения, отвечающие требованию (3.97), выбираются из множества решений системы уравнений (3.8а) при $M = M_2$ (где $M_2 = 4M_2'$, M_2' – нечетное натуральное число). Каждое из них относится к одной из следующих разновидностей решений:

$$m_1 = 2m_1', \qquad m_2 = 2m_2', \qquad m_3 = 2m_3' = m_{23}, \qquad (3.99а)$$

$$m_1 = 4m_1'', \qquad m_2 = 4m_2'', \qquad m_3 = 2m_3' = m_{23}, \qquad (3.99б)$$

$$m_1 = 2m_1', \qquad m_2 = 4m_2'', \qquad m_3 = 4m_3'' = m_{23}, \qquad (3.99в)$$

$$m_1 = 4m_1'', \qquad m_2 = 2m_2', \qquad m_3 = 4m_3'' = m_{23}, \qquad (3.99г)$$

где m_1'', m_2'', m_3'' – целые, m_1', m_2', m_3' – нечетные целые числа, не имеющие общего нечетного множителя.

Все остальные варианты решений исключаются из рассмотрения, так как имеют в качестве общего множителя 2 в целочисленной степени.

Отметим, наконец, что требованию

$$|\xi_1| = a_1\Big|_{<\tilde{\xi}_{11}\,\tilde{\xi}_{12}\,\tilde{\xi}_{13}>_\gamma}, \tag{3.100}$$

где $a_1\Big|_{<\tilde{\xi}_{11}\,\tilde{\xi}_{12}\,\tilde{\xi}_{13}>_\gamma}$ – период решетки γ в направлении $<\tilde{\xi}_{11}\,\tilde{\xi}_{12}\,\tilde{\xi}_{13}>_\gamma$, аналогичному требованию (3.97), следует подчинить [1] и каждый вектор ξ_1, удовлетворяющий условию (3.59), выделяя тем самым целочисленные значения

$$\tilde{\xi}_{11} = m_1,\ \tilde{\xi}_{12} = m_2,\ \tilde{\xi}_{13} = m_3$$

функций (3.75), (3.92), совпадающие с решениями m_1, m_2, m_3 систем уравнений (3.8б) – (3.8г) при $M = \tilde{\xi}_1$ (где $\tilde{\xi}_1 = 2\tilde{\xi}_1'$, $\tilde{\xi}_1'$ – нечетное натуральное число), не имеющими общего нечетного множителя, отличного от единицы, либо решениями систем уравнений (3.8а) при $M = \tilde{\xi}_1$ (где $\tilde{\xi}_1 = 4\tilde{\xi}_1'$, $\tilde{\xi}_1'$ – нечетное натуральное число), т. е. решениями вида (3.99), также не имеющими общего нечетного множителя, отличного от единицы.

---

[1] В противном случае двухмерная решетка ξ^2, построенная на векторах ξ_2, ξ_1 в плоскости $П_3$, будет заведомо подрешеткой двухмерной решетки γ^2 в плоскости $П_3$ и, стало быть, с решеткой γ^2 неотождествима.

Глава 4. ПЛОСКИЕ ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ РЕШЕТКИ КАК ИНВАРИАНТЫ ДЕФОРМАЦИОННОГО $\gamma \to \alpha$ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ СОБСТВЕННО ДЕФОРМАЦИИ γ-РЕШЕТКИ ПО БЕЙНУ

Реализуемость $\gamma \to \alpha$ перестройки путем однородной деформации с инвариантной плоскостью предполагает существование двухмерной решетки узлов ξ^2 в плоскости $П_3$, отождествимой с двухмерной решеткой, которую образуют узлы преобразуемой решетки γ, принадлежащие плоскости $П_3$. Условия, необходимые для существования такой решетки, устанавливаются в гл. 3 и требуют разрешимости уравнений относительно координат векторов ξ_1, ξ_2 (измеренных единицей $a_\gamma/2$) в целых числах, удовлетворяющих требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам векторов решетки γ, имеющих минимальную длину в соответствующих им кристаллографических направлениях.

Достаточными эти условия не являются, поскольку не всякая пара векторов решетки γ, взятых в некоторой плоскости $(h\,k\,l)_\gamma$, где h, k, l – целые числа, образует базис двухмерной решетки, узлы которой располагаются в плоскости $(h\,k\,l)_\gamma$. Так, векторы $\mathbf{X}_1 = a_\gamma[1\,2\,\bar{3}]_\gamma/2$, $\mathbf{X}_2 = a_\gamma[2\,\bar{1}\,\bar{1}]_\gamma/2$, например, будучи векторами решетки γ минимальной длины в направлениях $<1\,2\,3>_\gamma$, $<1\,1\,2>_\gamma$, не образуют базиса двухмерной решетки узлов в плоскости $(1\;1\;1)_\gamma$, на что указывает разложимость

$$\mathbf{X}_1 = \frac{a_\gamma}{2}[1\,\bar{1}\,0]_\gamma + 3\frac{a_\gamma}{2}[0\,1\,\bar{1}]_\gamma\,, \qquad \mathbf{X}_2 = 2\frac{a_\gamma}{2}[1\,\bar{1}\,0]_\gamma + \frac{a_\gamma}{2}[0\,1\,\bar{1}]_\gamma$$

каждого из векторов $\mathbf{X}_1$, $\mathbf{X}_2$ по векторам $a_\gamma[1\;\bar{1}\;0]_\gamma/2$, $a_\gamma[0\;1\;\bar{1}]_\gamma/2$ меньшей длины, взятым в той же плоскости $(1\;1\;1)_\gamma$. Решетка узлов, задаваемая этими векторами $\mathbf{X}_1$ и $\mathbf{X}_2$, не совмещается сама с собой при переносах на вектор $a_\gamma[1\;\bar{1}\;0]_\gamma/2$ и вектор $a_\gamma[0\,1\;\bar{1}]_\gamma/2$.

В случаях, подобных этому, решетка ξ^2, построенная на векторах ξ_1, ξ_2 в плоскости $П_3$, разложимых по векторам решетки γ, имеющим меньшую длину и принадлежащим плоскости $П_3$, будет всего лишь подрешеткой решетки γ^2 в плоскости $П_3$ и, следовательно, с решеткой γ^2 не отождествима. Последнее означает, что решетка γ^2 при деформации $\mathbf{L}$, преобразующей решетку γ в решетку α, самосовмещаться не может. Стало быть, не существует и дополнительной деформации **D**, способной восстановить исходное расположение узлов преобразуемой решетки в плоскости Π_3 и обеспечить вместе с тем самосовмещение узлов преобразованной решетки – решетки α в плоскости Π_3. Тогда ориентационно неизменная плоскость Π_3 как инвариантная плоскость не реализуема, если под инвариантной плоскостью подразумевать кристаллографическую плоскость, узлы которой не изменяют своих положений в результате деформационного преобразования **DL**.

Итак, дальнейшая задача сводится к изучению разрешимости уравнений относительно $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ в целых числах в зависимости от значений натуральных переменных N_{13}, n_{13}, n_g при заданных $\mathbf{X}_2$, $k \neq 0$ и к изучению разложимости векторов $\xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\xi_2 = \mathbf{X}_2$ по векторам решетки γ меньшей длины, взятым в плоскости Π_3.

4.1. Базисные векторы решеток ξ^2 в плоскостях семейства $\{\mathbf{lhh}\}_\gamma$

Рассмотрим решение задачи о разрешимости уравнений (3.75), (3.92) в целых числах на примере плоскостей Π_3, содержащих направление $<011>_\gamma$. Выбор его обусловлен следующими причинами. Во-первых, расстояние между соседними узлами решетки γ в направлении $<011>_\gamma$ минимально. Во-вторых, это направление указывается в ориентационных соотношениях Курдюмова – Закса, выражающих ориентационную связь между решетками кристаллов α-мартенсита и γ-аустенита.

В качестве вектора $\mathbf{X}_2$ решетки γ возьмем вектор из семейства векторов $a_\gamma <01\bar{1}>_\gamma /2$ и отождествим его с вектором ξ_2, полагая

$$\xi_2 = a_\gamma(m_{21}\mathbf{e}_1^\gamma + m_{22}\mathbf{e}_2^\gamma - s\eta\mathbf{e}_3^\gamma)/2 \ , \tag{4.1}$$

где $m_{21} = 0$; $m_{22} = \pm 1$ либо $m_{21} = \pm 1$; $m_{22} = 0$; $s\eta = \pm 1$.

Тогда $|m_{23}| = 1$, $M_2 = 2$, $f = 1/2$. Учитывая это, будем иметь

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k(m_{21}N_{13} + m_{22}s\eta|k|\beta c), \tag{4.2а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k(m_{22}N_{13} - m_{21}s\eta|k|\beta c) \ , \tag{4.2б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = \eta_k s\eta N_{13} \ , \tag{4.2в}$$

$$|k|\beta c = \sqrt{2|k|N_{13}} \ , \tag{4.3}$$

$$N_{13} \geq 3|k| \tag{4.4}$$

при ортогональных ξ_1, ξ_2 и

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \{m_{21}n_{13} + m_{22}s\eta|k|\beta c - m_{21}[(n_{13} - \eta_k\eta_g n_g)/2]\}\ , \tag{4.5а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \{m_{22}n_{13} - m_{21}s\eta|k|\beta c - m_{22}[(n_{13} - \eta_k\eta_g n_g)/2]\}\ , \tag{4.5б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = \eta_k s\eta(n_{13} - \eta_k\eta_g n_g)/2\ , \tag{4.5в}$$

$$|k|\beta c = \sqrt{|k|n_{13}}\ , \tag{4.6}$$

$$n_g = 1,\ n_{13} \geq 6|k| \tag{4.7}$$

при неортогональных ξ_1, ξ_2.

Вектор (4.1) и равенство

$$\kappa = \sqrt{2/(2+\tau^2)}\ , \tag{4.8}$$

следующее из (3.31) при $m_{23}^2/M_2 = 1/2$, фиксируют ориентацию базиса $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \mathbf{v}^3$:

$$\mathbf{v}^1 = \frac{\sqrt{2+\tau^2}}{\sqrt{2}[\tau^2 + \tau\sqrt{2(2+\tau^2)} - 2]}[(m_{21}s\eta\sqrt{2+\tau^2} + m_{22}\sqrt{2(2-\tau^2)})\mathbf{e}_1^\gamma +$$

$$+ (m_{22}s\eta\sqrt{2+\tau^2} - m_{21}\sqrt{2(2-\tau^2)})\mathbf{e}_2^\gamma + \sqrt{2+\tau^2}\,\mathbf{e}_3^\gamma]\ , \tag{4.9а}$$

$$\mathbf{v}^2 = (m_{21}\mathbf{e}_1^\gamma + m_{22}\mathbf{e}_2^\gamma - s\eta\mathbf{e}_3^\gamma)/\sqrt{2}\ , \tag{4.9б}$$

$$\mathbf{v}^3 = \frac{\sqrt{2}}{\tau^2 + \tau\sqrt{2(2+\tau^2)} - 2}[-(2m_{22}\tau + m_{21}s\eta\sqrt{2-\tau^2})\mathbf{e}_1^\gamma +$$

$$+ (2m_{21}\tau - m_{22}s\eta\sqrt{2-\tau^2})\mathbf{e}_2^\gamma - \sqrt{2-\tau^2}\,\mathbf{e}_3^\gamma] \tag{4.9в}$$

(см. формулы (3.38), (3.40) – (3.43)) и связывают деформационное преобразование **L** решетки γ в решетку α с ориентационными инвариантами

$$\mathbf{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2+\tau^2}}[(m_{21}s\eta\tau - m_{22}\sqrt{2-\tau^2})\mathbf{e}_1^\gamma +$$

$$+ (m_{22}s\eta\tau - m_{21}\sqrt{2-\tau^2})\mathbf{e}_2^\gamma + \tau\mathbf{e}_3^\gamma]\ , \tag{4.10а}$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}^2\ , \tag{4.10б}$$

$$\mathbf{v}_3 = \frac{1}{2\sqrt{2}}[(m_{21}s\eta\sqrt{2-\tau^2} - m_{22}\sqrt{2(2+\tau^2)})\mathbf{e}_1^\gamma +$$

$$+ (m_{22}s\eta\sqrt{2-\tau^2} + m_{21}\sqrt{2(2+\tau^2)})\mathbf{e}_2^\gamma + \sqrt{2-\tau^2}\mathbf{e}_3^\gamma]\ , \tag{4.10в}$$

(см. формулы (3.39), (3.44), (3.45)), где τ определяется формулой

$$\tau = \sqrt{2(N_{13} - |k|)/(N_{13} + |k|)} \tag{4.11а}$$

при ортогональных ξ_1, ξ_2 и формулой

$$\tau = \sqrt{2[2(n_{13} - |k|) + \eta_k \eta_g]/[2(n_{13} + |k|) + \eta_k \eta_g]} \tag{4.11б}$$

при неортогональных ξ_1, ξ_2.

Формулы (4.9), (4.10) позволяют перейти в (1.40) к базису (3.2) и выразить (см. (3.46)) тензор **L** в виде

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{n=1}^{3} \tilde{L}_{in} \mathbf{e}_i^{\gamma} \cdot \mathbf{e}_n^{\gamma} .$$

Матричные элементы $\tilde{L}_{in}$ его (см. (3.47)) относительного базиса (3.2) определяются формулами:

$$\tilde{L}_{11} = \frac{1}{2+\tau^2}\left[2m_{21}^2 + \left(\frac{m_{21}^2\tau}{\sqrt{2(2+\tau^2)}} + m_{22}^2\right)\left(\tau\sqrt{2(2+\tau^2)} + 2 - \tau^2\right)\right],$$

$$\tilde{L}_{12} = -\frac{s\eta\sqrt{2-\tau^2}}{(2+\tau^2)^{3/2}}\left(\sqrt{\frac{2+\tau^2}{2}} - \tau\right)\left(m_{22}^2\tau\sqrt{2} + m_{21}^2\sqrt{2+\tau^2}\right),$$

$$\tilde{L}_{13} = \frac{\tau\sqrt{2-\tau^2}}{(2+\tau^2)^{3/2}}\left[m_{21}s\eta\sqrt{\frac{2-\tau^2}{2}} - m_{22}\left(\sqrt{2+\tau^2} - \tau\sqrt{2}\right)\right],$$

$$\tilde{L}_{21} = \frac{s\eta\sqrt{2-\tau^2}}{(2+\tau^2)^{3/2}}\left(\sqrt{\frac{2+\tau^2}{2}} - \tau\right)\left(m_{21}^2\tau\sqrt{2} + m_{22}^2\sqrt{2+\tau^2}\right),$$

$$\tilde{L}_{22} = \frac{1}{2+\tau^2}\left[2m_{22}^2 + \left(\frac{m_{22}^2\tau}{\sqrt{2(2+\tau^2)}} + m_{21}^2\right)\left(\tau\sqrt{2(2+\tau^2)} + 2 - \tau^2\right)\right],$$

$$\tilde{L}_{23} = \frac{\tau\sqrt{2-\tau^2}}{(2+\tau^2)^{3/2}}\left[m_{22}s\eta\sqrt{\frac{2-\tau^2}{2}} + m_{21}\left(\sqrt{2+\tau^2} - \tau\sqrt{2}\right)\right],$$

$$\tilde{L}_{31} = \frac{1}{2+\tau^2}\left(\sqrt{\frac{2+\tau^2}{2}} - \tau\right)\left[m_{22}\sqrt{2-\tau^2} - s\eta m_{21}\left(\tau + \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2+\tau^2}}\right)\right],$$

$$\widetilde{L}_{32}=-\frac{1}{2+\tau^2}\left(\sqrt{\frac{2+\tau^2}{2}}-\tau\right)\left[m_{21}\sqrt{2-\tau^2}+s\eta m_{22}\left(\tau+\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2+\tau^2}}\right)\right],$$

$$\widetilde{L}_{33}=\frac{\tau}{2+\tau^2}\left(2\tau+\frac{2-\tau^2}{\sqrt{2(2+\tau^2)}}\right),$$

где τ принимает значения, соответствующие тем значениям параметра $|k|$ и переменной N_{13} или переменных n_{13}, η_k, η_g (см. формулы (4.11)), при которых вектор ξ_1, задаваемый координатами (4.2) или (4.5), совпадает с вектором решетки γ.

4.2. Целочисленные решения уравнений относительно координат вектора ξ_1 при ортогональных ξ_1 и ξ_2

Уравнения (4.2) разрешаются в целых числах, если существуют натуральные N_{13}, которым соответствуют натуральные значения функции (4.3). Покажем, что такие N_{13} найдутся при подходящем выборе задаваемого параметра $|k|$.

Заметим, что натуральное $|k|$ можно представить в виде произведения $|k|=2^{\lambda}k'$, где λ – целое неотрицательное число, выделяя явным образом множитель 2^{λ}, кратный 2 при $\lambda\geq 1$, и нечетный множитель k'. Последний можно также представить в виде произведения $k'=\widetilde{k}^2\bar{k}$, принимая во внимание вид зависимости переменной $|k|\beta c$ от параметра $|k|$ (см. формулу (4.3)), где $\widetilde{k}^2$ – произведение простых нечетных чисел, взятых в четных степенях, а $\bar{k}$ – произведение простых нечетных чисел, взятых в степени 0 или 1, т. е.

$$\widetilde{k}^2=3^{2\lambda_3'}5^{2\lambda_5'}7^{2\lambda_7'}\ldots,\ \lambda_3',\lambda_5',\lambda_7',\ldots=0,1,2,\ldots, \tag{4.12а}$$

$$\bar{k}=3^{\lambda_3}5^{\lambda_5}7^{\lambda_7}\ldots,\ \lambda_3,\lambda_5,\lambda_7,\ldots=0,1. \tag{4.12б}$$

Тогда задаваемый параметр $|k|$ будет выражаться формулой

$$|k|=2^{\lambda}\widetilde{k}^2\bar{k}. \tag{4.13}$$

Исключая теперь $|k|$ в (4.3) с помощью (4.13), получим

$$|k|\beta c=\widetilde{k}\sqrt{2^{\lambda+1}\bar{k}N_{13}}.$$

Если значения натуральной переменной N_{13} выбирать, следуя формуле

$$N_{13}=2^{2\nu-\lambda-1}\bar{k}\widetilde{N}_{13}^2, \tag{4.14}$$

где $2\nu-\lambda-1\geq 0$, ν – натуральное число, $\widetilde{N}_{13}$ – нечетное натуральное число, удовлетворяющее неравенству

$$\widetilde{N}_{13}\geq 2^{\lambda-\nu}\sqrt{6}\,\widetilde{k} \qquad (4.15)$$

(см. (4.4), (4.13), (4.14)), то переменная $|k|\beta c$ будет принимать натуральные значения, равные $2^{\nu}\widetilde{k}\,\bar{k}\,\widetilde{N}_{13}$, а функции (4.2) – целочисленные значения, равные:

$$\widetilde{\xi}_{11}=\bar{k}\,\widetilde{N}_{13}\eta_k\left(2^{2\nu-\lambda-1}m_{21}\widetilde{N}_{13}+2^{\nu}m_{22}s\eta\widetilde{k}\right), \qquad (4.16а)$$

$$\widetilde{\xi}_{12}=\bar{k}\,\widetilde{N}_{13}\eta_k\left(2^{2\nu-\lambda-1}m_{22}\widetilde{N}_{13}-2^{\nu}m_{21}s\eta\widetilde{k}\right), \qquad (4.16б)$$

$$\widetilde{\xi}_{13}=\bar{k}\,\widetilde{N}_{13}2^{2\nu-\lambda-1}\eta_k s\eta\widetilde{N}_{13}\ . \qquad (4.16в)$$

Подстановка (4.16) в (3.53) приводит к формуле

$$\xi_1=\bar{k}\,\widetilde{N}_{13}\eta_k\mathbf{X}_1'(\lambda,\widetilde{k},\nu,\widetilde{N}_{13})\ , \qquad (4.17)$$

посредством которой каждому набору значений параметров $\lambda,\widetilde{k},\bar{k}$ и переменных ν, $\widetilde{N}_{13}$ ставится в соответствие вектор решетки γ, где

$$\mathbf{X}_1'(\lambda,\widetilde{k},\nu,\widetilde{N}_{13})=\frac{a_\gamma}{2}[(2^{2\nu-\lambda-1}m_{21}\widetilde{N}_{13}+2^{\nu}m_{22}s\eta\widetilde{k})\mathbf{e}_1^{\gamma}+$$

$$+(2^{2\nu-\lambda-1}m_{22}\widetilde{N}_{13}-2^{\nu}m_{21}s\eta\widetilde{k})\mathbf{e}_2^{\gamma}+e^{2\nu-\lambda-1}s\eta\widetilde{N}_{13}\mathbf{e}_3^{\gamma}] \qquad (4.18)$$

есть также вектор решетки γ.

4.3. Целочисленные решения уравнений относительно координат вектора ξ_1 при неортогональных ξ_1 и ξ_2

Уравнения (4.5) также разрешимы в целых числах лишь при выделенных значениях параметра $|k|$ и переменной n_{13}. Так, переменная (4.6) принимает натуральные значения: $|k|\beta c=2^{\lambda}\widetilde{k}\bar{k}\widetilde{n}_{13}$, а функции (4.5) – целочисленные значения:

$$\widetilde{\xi}_{11}=\eta_k\left\{[m_{21}(\bar{k}\widetilde{n}_{13}^2+\eta_k\eta_g)/2]+2^{\lambda}m_{22}s\eta\widetilde{k}\bar{k}\widetilde{n}_{13}\right\}, \qquad (4.19а)$$

$$\widetilde{\xi}_{12}=\eta_k\left\{[m_{22}(\bar{k}\widetilde{n}_{13}^2+\eta_k\eta_g)/2]-2^{\lambda}m_{21}s\eta\widetilde{k}\bar{k}\widetilde{n}_{13}\right\}, \qquad (4.19б)$$

$$\widetilde{\xi}_{13}=\eta_k s\eta(\bar{k}\widetilde{n}_{13}^2-\eta_k\eta_g)/2\ , \qquad (4.19в)$$

если

$$|k|=2^{2\lambda}\widetilde{k}^2\bar{k},\quad n_{13}=\bar{k}\,\widetilde{n}_{13}^2\ , \qquad (4.20)$$

где λ – целое неотрицательное число; $\widetilde{k}^2,\bar{k}$ определяются формулами (4.12); $\widetilde{n}_{13}$ – нечетное натуральное число, удовлетворяющее неравенству

$$\tilde{n}_{13} \geq 2^{\lambda}\sqrt{6}\,\tilde{k} \qquad (4.21)$$

(см. (4.7), (4.20)).

При $m_{21} = 0$, $|m_{22}| = 1$, $\lambda \geq 1$ значения функции $\tilde{\xi}_{11}$ – числа четные, а значения функций $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ – числа разной четности, так как отличаются одно от другого на величину $\eta_g = \pm 1$. Вектор, одна из целочисленных координат которого – число нечетное, а другие две – числа четные, вектором решетки γ быть не может (см. (3.8)). Точно так же обстоит дело и при $|m_{21}| = 1$, $m_{22} = 0$, $\lambda \geq 1$. Следовательно, значения функций (4.19) отвечают требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам векторов решетки γ, если λ = 0, т. е. если задаваемый параметр $|k|$ – нечетное число:

$$|k| = \tilde{k}^2\bar{k} \, . \qquad (4.22)$$

Формулы (4.19) и неравенство (4.21) при λ = 0 записываются в виде:

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \left\{[m_{21}(\bar{k}\tilde{n}_{13}^2 + \eta_k\eta_g)/2] + m_{22}s\eta\tilde{k}\bar{k}\tilde{n}_{13}\right\}, \qquad (4.23а)$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \left\{[m_{22}(\bar{k}\tilde{n}_{13}^2 + \eta_k\eta_g)/2] - m_{21}s\eta\tilde{k}\bar{k}\tilde{n}_{13}\right\}, \qquad (4.23б)$$

$$\tilde{\xi}_{13} = \eta_k s\eta(\bar{k}\tilde{n}_{13}^2 - \eta_k\eta_g)/2 \, , \qquad (4.23в)$$

$$\tilde{n}_{13} \geq \sqrt{6}\,\tilde{k} \, . \qquad (4.24)$$

Переходя в (3.53) к явным выражениям (4.23) для $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$, будем иметь:

$$\begin{aligned}\xi_1 = (a_\gamma/2)\eta_k\{&m_{22}s\eta\tilde{k}\bar{k}\tilde{n}_{13}\mathbf{e}_1^\gamma + m_{22}[(\bar{k}\tilde{n}_{13}^2 + \eta_k\eta_g)/2]\mathbf{e}_2^\gamma + \\ &+ s\eta[(\bar{k}\tilde{n}_{13}^2 - \eta_k\eta_g)/2]\mathbf{e}_3^\gamma\} \, ,\end{aligned} \qquad (4.25а)$$

если $m_{21} = 0, m_{22} = \pm 1$,

$$\begin{aligned}\xi_1 = (a_\gamma/2)\eta_k\{&m_{21}[(\bar{k}\tilde{n}_{13}^2 + \eta_k\eta_g)/2]\mathbf{e}_1^\gamma - m_{21}s\eta\tilde{k}\bar{k}\tilde{n}_{13}\mathbf{e}_2^\gamma + \\ &+ s\eta[(\bar{k}\tilde{n}_{13}^2 - \eta_k\eta_g)/2]\mathbf{e}_3^\gamma\} \, ,\end{aligned} \qquad (4.25б)$$

если $m_{21} = \pm 1, m_{22} = 0$.

4.4. Кристаллография прямоугольных решеток ξ^2 в плоскостях Π_3 семейства $\{lhh\}_\gamma$

Обсудим полученные результаты, начиная со случая ортогональных ξ_1 и ξ_2.

Векторы ξ_1 (4.17) и ξ_2 (4.1) образуют базис двухмерной решетки ξ^2, узлы которой располагаются в ориентационно неизменной плоскости

$$\Pi_3 = \left(-2^{2\nu-\lambda-1} m_{22}\tilde{N}_{13} \quad 2^{\nu-1} s\eta m_{22}\tilde{k} \quad 2^{\nu-1}\tilde{k}\right)_\gamma \ , \tag{4.26а}$$

если $m_{21} = 0$, $m_{22} = \pm 1$, и в плоскости

$$\Pi_3 = \left(2^{\nu-1} s\eta m_{21}\tilde{k} \quad 2^{2\nu-\lambda-1} m_{21}\tilde{N}_{13} \quad 2^{\nu-1}\tilde{k}\right)_\gamma \ , \tag{4.26б}$$

если $m_{21} = \pm 1$, $m_{22} = 0$.

Правая часть в формулах (4.26) не содержит множителя $\bar{k}$, входящего в разложение на множители (4.13) параметра $|k|$. Границы интервалов допустимых значений переменных ν и $\tilde{N}_{13}$ также не зависят от $\bar{k}$. Следовательно, выбор значения $\bar{k}$ на ориентацию плоскости (4.26) не влияет. Объясняется это тем, что геометрические характеристики преобразования решетки γ в решетку α, допускающего существование ориентационных инвариантов (4.1), (4.26) – однородные функции $\tilde{N}_{13}$ и $|k|$ степени 0 (см. (4.8), (4.11а)). Характеристики эти в рассматриваемом случае можно выразить формулами:

$$\kappa = 2^{-1/2}\sqrt{1 + 2^{2(\lambda-\nu)+1}(\tilde{k}/\tilde{N}_{13})^2} \ , \tag{4.27а}$$

$$\tau = \sqrt{2[1 - 2^{2(\lambda-\nu)+1}(\tilde{k}/\tilde{N}_{13})^2]/[1 + 2^{2(\lambda-\nu)+1}(\tilde{k}/\tilde{N}_{13})^2]} \ , \tag{4.27б}$$

учитывая (4.13) и (4.14), которые в качестве переменных содержат разность $\lambda - \nu$ и отношение $\tilde{k}/\tilde{N}_{13}$.

Заметим, однако, что решетка ξ^2, построенная на векторах (4.1), (4.17), не отождествима с двухмерной решеткой γ^2, которую образуют узлы решетки γ, лежащие в плоскости (4.26), поскольку период решетки ξ^2 в направлении $\xi_1/|\xi_1|$, равный модулю вектора (4.17), заведомо превосходит период решетки γ в этом направлении. Основанием для такого утверждения при $\lambda - \nu \ge 0$ служит непосредственно формула (4.17), если учесть, что минимальное значение $\tilde{N}_{13}$, допускаемое неравенством (4.15), не равно единице, а также тот факт, что вектор $\mathbf{X}_1'$ (4.18) является вектором решетки γ. При $\lambda - \nu < 0$ значение $\tilde{N}_{13}=1$ не противоречит неравенству (4.15), если $2^{\lambda-\nu}\sqrt{6}\,\tilde{k} < 1$, т. е. при $\nu \ge 2$ и $\nu - \lambda - 1 > \ln(\tilde{k}\sqrt{3/2})/\ln 2$, где $\ln(\tilde{k}\sqrt{3/2})/\ln 2 \approx 0{,}3$; 1,9; 2,6 соответственно при $\tilde{k} = 1$; 3; 5. Однако вектор ξ_1 в этом случае выражается формулой

$$\xi_1 = 2\bar{k}\,\tilde{N}_{13}\eta_k \mathbf{X}_1'' \ ,$$

где

$$\mathbf{X}_1'' = (a_\gamma/2)[(2^{2\nu-\lambda-2} m_{21}\tilde{N}_{13} + 2^{\nu-1} m_{22} s\eta\tilde{k})\mathbf{e}_1^\gamma +$$
$$+(2^{2\nu-\lambda-2} m_{22}\tilde{N}_{13} - 2^{\nu-1} m_{21} s\eta\tilde{k})\mathbf{e}_2^\gamma + 2^{2\nu-\lambda-2} s\eta\tilde{N}_{13}\mathbf{e}_3^\gamma]$$

есть вектор решетки γ, явным образом указывающей на то, что вектор ξ_1 не является вектором минимальной длины в направлении $\xi_1 / |\xi_1|$.

Что же касается плоскостей $\{7\,\bar{5}\,5\}_\gamma$, $\{5\,\bar{2}\,2\}_\gamma$, ориентационно близких к габитусным плоскостям кристаллов α-мартенсита и содержащих направление $<011>_\gamma$, то плоскости $\{7\,\bar{5}\,5\}_\gamma$, например, семейству ориентационно неизменных плоскостей (4.26) принадлежать не могут. Действительно, условие параллельности плоскостей (4.26а) и $(\bar{7}m_{22}\ 5s\eta m_{22}\ 5)_\gamma$, (4.26б) и $(5s\eta m_{21}\ 7m_{21}\ 5)_\gamma$, выражаемое равенством $\tilde{N}_{13}/7 = 2^{\lambda-\nu}\tilde{k}/5$, предполагает в свою очередь справедливость равенств $\lambda - \nu = 0$, $\tilde{N}_{13}/\tilde{k} = 7/5$, второе из которых несовместимо с неравенством (4.15) при $\lambda - \nu = 0$.

Иначе обстоит дело с плоскостями $\{5\,\bar{2}\,2\}_\gamma$. Условие $\tilde{N}_{13}/5 = 2^{\lambda-\nu-1}\tilde{k}$ параллельности плоскостей (4.26а) и $(\bar{5}m_{22}\ 2s\eta m_{22}\ 2)_\gamma$, (4.26б) и $(2s\eta m_{21}\ 5m_{21}\ 2)_\gamma$ выполняется при $\lambda - \nu - 1 = 0$, $\nu \geq 2$ и $\tilde{N}_{13}/\tilde{k} = 5$, что не противоречит неравенству $\tilde{N}_{13}/\tilde{k} \geq 2\sqrt{6}$, которое следует из (4.15) при $\lambda - \nu - 1 = 0$.

Полагая $\tilde{N}_{13} = 5\tilde{k}$, $\lambda - \nu = 1$, $\nu \geq 2$ в формулах (4.27), будем иметь

$$\kappa = \sqrt{66}/10 \approx 0{,}8124\ ,\quad \tau = \sqrt{1122}/33 \approx 1{,}0150\ ,$$

Базис двухмерной прямоугольной решетки ξ^2 в ориентационно неизменных плоскостях $(2s\eta m_{21}\ 5m_{21}\ 2)_\gamma$, $(\bar{5}m_{22}\ 2s\eta m_{22}\ 2)_\gamma$ образуют векторы:

$$\xi_1 = 5\eta_k(a_\gamma/2)[(5m_{21} + 4m_{22}s\eta)\,\mathbf{e}_1^\gamma + (5m_{22} - 4m_{21}s\eta)\,\mathbf{e}_2^\gamma + {}$$
$$+5s\eta\mathbf{e}_3^\gamma]\ , \tag{4.28а}$$

$$\xi_2 = (a_\gamma/2)(m_{21}\mathbf{e}_1^\gamma + m_{22}\mathbf{e}_2^\gamma - s\eta\mathbf{e}_3^\gamma)\ . \tag{4.28б}$$

Матричные элементы тензора **L**, допускающего такие инварианты, тензор Бейна (1.5) и его собственные векторы (3.9) выражаются в базисе (3.2) соответственно формулами:

$$\tilde{L}_{11} = m_{21}^2 A + m_{22}^2 T\,,\quad \tilde{L}_{12} = -m_{21}^2 s\eta D - m_{22}^2 s\eta B\,,$$
$$\tilde{L}_{13} = m_{21}s\eta(A-1) - m_{22}B\,,\quad \tilde{L}_{21} = m_{21}^2 s\eta B + m_{22}^2 s\eta D\,,$$
$$\tilde{L}_{22} = m_{21}^2 T + m_{22}^2 A\,,\quad \tilde{L}_{23} = m_{21}B + m_{22}s\eta(A-1)\,,$$
$$\tilde{L}_{31} = -m_{21}s\eta C + m_{22}D\,,\quad \tilde{L}_{32} = -m_{21}D - m_{22}s\eta C\,,\quad \tilde{L}_{33} = 1 - C\,,$$

где

$$A = 1 + (4\sqrt{17}/125)\,,\quad T = (8 + 5\sqrt{17})/25\,,\quad D = 2(5 - \sqrt{17})/25\,;$$

$$B=2\sqrt{17}(5-\sqrt{17})/125,\quad C=4(10-\sqrt{17})/125;$$

$$\mathbf{E}=(\sqrt{33}/5)\mathbf{I}+[(\sqrt{17}-\sqrt{33})/5]\,\mathbf{e}_3^\gamma\cdot\mathbf{e}_3^\gamma;$$

$$\mathbf{e}_k=[\mathbf{e}_1^\gamma+(-1)^k\mathbf{e}_2^\gamma]/\sqrt{2},\ k=1,2,\quad \mathbf{e}_3=\mathbf{e}_3^\gamma.$$

Ориентационное соответствие между решетками α и γ устанавливается соотношениями

$$\mathbf{e}_k^\alpha=\mathbf{L}\mathbf{e}_k/|\mathbf{L}\mathbf{e}_k|,\ k=1,2,\quad \mathbf{e}_3^\alpha=\mathbf{L}\mathbf{e}_3/|\mathbf{L}\mathbf{e}_3|. \tag{4.29}$$

Орты $\mathbf{e}_1^\alpha$, $\mathbf{e}_2^\alpha$ в решетке α направлены вдоль осей симметрии второго порядка, а орт $\mathbf{e}_3^\alpha$ – вдоль оси симметрии четвертого порядка. В явном виде эти орты выражаются формулами:

$$\mathbf{e}_1^\alpha=\frac{1}{25\sqrt{66}}\Big\{[m_{21}^2(175-6\sqrt{17})+m_{22}^2(6+35\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_1^\gamma-[m_{21}^2(74+15\sqrt{17})+$$

$$+m_{22}^2(75+14\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_2^\gamma+[2m_{21}(5-3\sqrt{17})+2m_{22}(45-7\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_3^\gamma\Big\},$$

$$\mathbf{e}_2^\alpha=\frac{1}{25\sqrt{66}}\Big\{[m_{21}^2(75+14\sqrt{17})+m_{22}^2(74+15\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_1^\gamma+[m_{21}^2(6+35\sqrt{17})+$$

$$+m_{22}^2(175-6\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_2^\gamma+[-2m_{21}(45-7\sqrt{17})+2m_{22}(5-3\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_3^\gamma\Big\},$$

$$\mathbf{e}_3^\alpha=\frac{1}{25}\Big\{[4m_{21}-2m_{22}(5-\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_1^\gamma+[2m_{21}(5-\sqrt{17})+4m_{22}]\,\mathbf{e}_2^\gamma+$$

$$+(4+5\sqrt{17})\,\mathbf{e}_3^\gamma\Big\},$$

если $s\eta=1$, и формулами:

$$\mathbf{e}_1^\alpha=\frac{1}{25\sqrt{66}}\Big\{[m_{21}^2(75+14\sqrt{17})+m_{22}^2(74+15\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_1^\gamma-[m_{21}^2(6+35\sqrt{17})+$$

$$+m_{22}^2(175-6\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_2^\gamma+[2m_{21}(45-7\sqrt{17})+2m_{22}(5-3\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_3^\gamma\Big\},$$

$$\mathbf{e}_2^\alpha=\frac{1}{25\sqrt{66}}\Big\{[m_{21}^2(175-6\sqrt{17})+m_{22}^2(6+35\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_1^\gamma+[m_{21}^2(74+15\sqrt{17})+$$

$$+m_{22}^2(75+14\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_2^\gamma+[-2m_{21}(5-3\sqrt{17})+2m_{22}(45-7\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_3^\gamma,$$

$$\mathbf{e}_3^\alpha=\frac{1}{25}\Big\{-[4m_{21}+2m_{22}(5-\sqrt{17})]\,\mathbf{e}_1^\gamma+[2m_{21}(5-\sqrt{17})-4m_{22}]\,\mathbf{e}_2^\gamma+$$

$$+(4+5\sqrt{17})\,\mathbf{e}_3^\gamma\Big\},$$

если $s\eta=-1$.

Инвариантное относительно деформационного $\gamma \to \alpha$ преобразования направление $\xi_2 / |\xi_2|$ в осях (4.29) решетки α определяется формулой

$$\frac{\xi_2}{|\xi_2|} = \frac{1}{10}\left[\sqrt{33}(m_{21} - m_{22})\mathbf{e}_1^\alpha + \sqrt{33}(m_{21} + m_{22})\mathbf{e}_2^\alpha - s\eta\sqrt{34}\,\mathbf{e}_3^\alpha\right],$$

т. е. взаимная ориентация решеток α и γ отвечает ориентационным соотношениям Курдюмова – Закса.

Базисом двухмерной решетки γ^2, образованной узлами решетки γ, лежащими в плоскости $(2s\eta m_{21}\ 5m_{21}\ 2)_\gamma$ служат векторы

$$a_\gamma(m_{21}\mathbf{e}_1^\gamma - s\eta\mathbf{e}_3^\gamma)/2, \quad a_\gamma(5m_{21}\mathbf{e}_1^\gamma - 4m_{21}s\eta\mathbf{e}_2^\gamma + 5s\eta\mathbf{e}_3^\gamma)/2\ ,$$

тогда как решетка ξ^2, построенная на векторах ξ_1, ξ_2 (см. (4.28)) в этой плоскости, имеет период в направлении $\xi_1 / |\xi_1|$, превосходящий период решетки γ^2 в пять раз, и, следовательно, решетке γ^2 не тождественна.

Не является исключением в этом отношении и решетка ξ^2, узлы которой располагаются в плоскости $(\bar{5}m_{22}\ 2s\eta m_{22}\ 2)_\gamma$, поскольку период ее в направлении $\xi_1 / |\xi_1|$ не совпадает (см. (4.28а)) с периодом решетки γ.

В дополнение к сказанному отметим, что плоскости $\{111\}_\gamma$ семейству ориентационо неизменных плоскостей (4.26) принадлежать не могут, поскольку среди допустимых значений переменной $\widetilde{N}_{13}$ нет значения, которое удовлетворяло бы условию параллельности плоскостей (4.26) и $\{111\}_\gamma$.

4.5. Кристаллография непрямоугольных решеток ξ^2 в плоскостях Π_3 семейства $\{lhh\}_\gamma$

Обратимся теперь к случаю неортогональных ξ_1 и ξ_2.

Узлы решетки ξ^2, построенной на векторах (4.25), (4.1), располагаются в плоскости

$$\Pi_3 = \left(m_{21}s\eta\widetilde{k} - m_{22}\widetilde{n}_{13} \quad m_{21}\widetilde{n}_{13} + m_{22}s\eta\widetilde{k} \quad \widetilde{k}\right)_\gamma . \tag{4.30}$$

Ориентация плоскости (4.30) и геометрические характеристики

$$\kappa = 2^{-1/2}\sqrt{1 + 2(\widetilde{k}/\widetilde{n}_{13})^2}\ , \tag{4.31а}$$

$$\tau = \sqrt{2[1 - 2(\widetilde{k}/\widetilde{n}_{13})^2]/[1 + 2(\widetilde{k}/\widetilde{n}_{13})^2]}\ , \tag{4.31б}$$

преобразования решетки γ в решетку α, допускающего существование ориентационных инвариантов (4.1), (4.30), не зависят от множителя $\bar{k}$ (см. (4.22)), входящего в разложение на множители задаваемого параметра $|k|$.

Область допустимых значений нечетной натуральной переменной $\tilde{n}_{13}$ определяется неравенством (4.24) и от $\bar{k}$ также не зависит. Неравенство (4.24) исключает плоскости $\{7\,5\,5\}_\gamma$ и $\{1\,1\,1\}_\gamma$ из семейства плоскостей (4.30), в чем нетрудно убедиться, замечая, что условия $\tilde{n}_{13}/\tilde{k} = 7/5$, $\tilde{n}_{13}/\tilde{k} = 1$ параллельности плоскостей $(\bar{7}m_{22}\ 5s\eta m_{22}\ 5)_\gamma$, $(5s\eta m_{21}\ 7m_{21}\ 5)_\gamma$ и $(\bar{1}m_{22}\ m_{22}s\eta\ 1)_\gamma$, $(m_{21}s\eta\ m_{21}\ 1)_\gamma$ плоскостям семейства (4.30) не выполняются в силу неравенства $\tilde{n}_{13}/\tilde{k} \ge \sqrt{6} \approx 2{,}4$, следующего из (4.24).

Заметим, наконец, что решетка ξ^2, построенная на векторах (4.1), (4.25), не отождествима с двухмерной решеткой γ^2, которую образуют узлы решетки γ, принадлежащие плоскости (4.30), поскольку она не тождественна решетке, построенной на векторах (4.1), и

$$\mathbf{X}_1' = (a_\gamma/2)\left[\left(m_{21}\frac{\tilde{n}_{13}-1}{2} + m_{22}s\eta\tilde{k}\right)\mathbf{e}_1^\gamma + \right.$$

$$\left. + \left(m_{22}\frac{\tilde{n}_{13}-1}{2} - m_{21}s\eta\tilde{k}\right)\mathbf{e}_2^\gamma + s\eta\frac{\tilde{n}_{13}+1}{2}\mathbf{e}_3^\gamma\right]$$

в плоскости (4.30), где $|(\mathbf{X}_1', \xi_2)| = |(\xi_1, \xi_2)|$, $|\mathbf{X}_1'| < |\xi_1|$.

Итак, деформационное преобразование (2.59) решетки γ в решетку α допускает существование ориентационно неизменных плоскостей Π_3 (см. (4.26), (4.30)), каждая из которых содержит направление $<0\,1\,\underline{1}>_\gamma$ и совпадает с кристаллографической плоскостью решетки γ, если геометрические характеристики преобразования принимают значения, определяемые формулами (4.27), (4.31). Однако ни одна из плоскостей (4.26), (4.30) не реализуема как инвариантная плоскость, поскольку двухмерная решетка γ^2, образованная узлами решетки γ, принадлежащими любой из плоскостей (4.26) (4.30), не совпадает с решеткой ξ^2 и, следовательно, не может совмещаться сама с собой при деформации (2.59).

Рассмотренный пример наглядно показывает, что не всякое решение уравнений (3.75), (3.92), найденное при заданном $\mathbf{X}_2$ и удовлетворяющее требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, оказывается приемлемым с точки зрения требований, предъявляемых к базисным векторам двухмерной решетки γ^2. Следовательно, при изучении разрешимости уравнений (3.75) – (3.78), (3.92) – (3.95) необходим подход, позволяющий систематическим образом исключать варианты базисных векторов $\xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\xi_2 = \mathbf{X}_2$ решетки ξ^2, заведомо разложимых по векторам решетки γ^2 меньшей длины. Основой для такого подхода может служить использование зависимости между значениями натуральных переменных N_{13}, n_{13}, n_g в (3.75) – (3.77), (3.92), (3.93), (3.95) и значениями множителей, входящих в разложения на простые множители координаты m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ и суммы M_2 квадратов его координат, которая возникает, как показано в приложениях, если искать значения функций (3.75), отвечающие требованию целочисленности и требованию (3.100).

4.6. Зависимость выделенных значений натуральной переменной $\mathbf{N_{13}}$ от задаваемых параметров $\mathbf{m_{23}}$, $\mathbf{M_2}$

Обобщим выводы, полученные в прил. 1. Для этого выразим $|m_{23}|$ и M_2 в виде произведений

$$|m_{23}| = 2^{\beta} P\ , \quad M_2 = 2^{\lambda} P' M\ , \tag{4.32}$$

где $\beta = 0, 1, 2, \ldots$; $\lambda = 1, 2$; P, P', M – нечетные натуральные числа.

Множители P и M предполагаются взаимно простыми, поэтому $P' = 1$, если $P = 1$. Значения множителей P, P', M и показателей степени β, λ, найденные при использовании данных табл. 3.2, приводятся в качестве иллюстрации в табл. 4.1.

При $P > 1$ множители P, P', где $P' \geq 1$, можно представить в виде произведений

$$P = P_1^{a_1} P_2^{a_2} \ldots P_p^{a_p}\ , \quad P' = P_1^{a'_1} P_2^{a'_2} \ldots P_p^{a'_p} \tag{4.33}$$

простых нечетных чисел $P_1, P_2, \ldots, P_p$, где

$$a_1, a_2, \ldots, a_p = 1, 2, 3, \ldots\ ,$$
$$a'_1, a'_2, \ldots, a'_p = 0, 1, 2, \ldots\ . \tag{4.34}$$

Множители $P_1, P_2, \ldots, P_p$ удобно разбить на группы, следуя соотношениям (П1.2), (П1.14), (П1.23) между показателями степеней.

Таблица 4.1

К разложению параметров $|m_{23}|$, M_2 в произведения

M_2	$\|m_{23}\|$	β	P	λ	P'	M	μ_1	μ_2	μ_3	μ'_1	μ'_3	δ	μ'_2	Δ	ρ	ρ'	$\rho'M$
2	1	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	1	1
22	3	0	3	1	1	11	3	1	1	1	1	0	1	13	9	1	11
26	3	0	3	1	1	13	3	1	1	1	1	0	1	17	9	1	13
34	4	2	1	1	1	17	1	1	1	1	1	1	1	9	1	1	17
36	4	2	1	2	1	9	1	1	1	1	1	2	1	5	1	1	9
42	4	2	1	1	1	21	1	1	1	1	1	1	1	13	1	1	21
50	5	0	5	1	25	1	1	5	1	1	1	0	25	1	1	1	1
54	5	0	5	1	1	27	5	1	1	1	1	0	1	29	25	1	27
62	5	0	5	1	1	31	5	1	1	1	1	0	1	37	25	1	31
62	6	1	3	1	1	31	3	1	1	1	1	1	1	13	9	1	31
66	5	0	5	1	1	33	5	1	1	1	1	0	1	41	25	1	33
68	6	1	3	2	1	17	3	1	1	1	1	5	1	1	9	1	17
70	5	0	5	1	5	7	5	1	1	5	1	0	1	9	5	1	7
70	6	1	3	1	1	35	3	1	1	1	1	1	1	17	9	1	35
74	5	0	5	1	1	37	5	1	1	1	1	0	1	49	25	1	37

К первой группе отнесем множители

$$P_{i_1} \equiv \mu_{11} < P_{i_2} \equiv \mu_{12} < \ldots < P_{i_{t_1}} \equiv \mu_{1t_1} , \qquad (4.35)$$

показатели степени $a'_{i_n} \equiv \alpha'_{1n}$, $a_{i_n} \equiv \alpha_{1n}$, $n = 1, 2,\ldots, t_1$ при которых в произведениях (4.33) отвечают условиям:

$$0 \le a'_{i_1} < 2a_{i_1}, \quad 0 \le a'_{i_2} < 2a_{i_2}, \ldots, \quad 0 \le a'_{i_{t_1}} < 2a_{i_{t_1}} , \qquad (4.36)$$

и из множителей (4.35) образуем произведения:

$$\mu_1 = \prod_{n=1}^{t_1} P_{i_n}^{a_{i_n}} = \prod_{n=1}^{t_1} \mu_{1n}^{\alpha_{1n}} , \ \ \alpha_{1n} = 1, 2, \ldots , \qquad (4.37а)$$

$$\mu'_1 = \prod_{n=1}^{t_1} P_{i_n}^{a'_{i_n}} = \prod_{n=1}^{t_1} \mu_{1n}^{\alpha'_{1n}} , \ \ 0 \le \alpha'_{1n} < 2\alpha_{1n} . \qquad (4.37б)$$

Если ни один из показателей степени (4.34) не удовлетворяет условиям (4.36), то будем полагать $\mu_1 = 1$, $\mu'_1 = 1$.Ко второй группе отнесем множители

$$P_{k_1} \equiv \mu_{21} < P_{k_2} \equiv \mu_{22} < \ldots < P_{k_{t_2}} \equiv \mu_{2t_2} , \qquad (4.38)$$

показатели степени $a'_{k_n} \equiv \alpha'_{2n}$, $a_{k_n} \equiv \alpha_{2n}$, $n = 1, 2, \ldots, t_2$ при которых в (4.33) отвечают условиям:

$$a'_{k_1} = 2a_{k_1}, \quad a'_{k_2} = 2a_{k_2}, \ \ldots , \quad a'_{k_{t_2}} = 2a_{k_{t_2}}, \qquad (4.39)$$

и образуем из множителей (4.38) произведения:

$$\mu_2 = \prod_{n=1}^{t_2} P_{k_n}^{a_{k_n}} = \prod_{n=1}^{t_2} \mu_{2n}^{\alpha_{2n}} , \ \ \alpha_{2n} = 1, 2, \ldots , \qquad (4.40а)$$

$$\mu_2^2 = \prod_{n=1}^{t_2} P_{k_n}^{a'_{k_n}} = \prod_{n=1}^{t_2} \mu_{2n}^{\alpha'_{2n}} , \ \ \alpha'_{2n} = 2\alpha_{2n} . \qquad (4.40б)$$

При отсутствии показателей, удовлетворяющих условиям (4.39), будем полагать $\mu_2 = 1$.

К третьей группе отнесем множители

$$P_{l_1} \equiv \mu_{31} < P_{l_2} \equiv \mu_{32} < \ldots < P_{l_{t_3}} \equiv \mu_{3t_3} , \qquad (4.41)$$

показатели степени $a'_{l_n} \equiv \alpha'_{3n}$, $a_{l_n} \equiv \alpha_{3n}$, $n = 1, 2,\ldots, t_3$ при которых в (4.33) отвечают условиям:

$$a'_{l_1} > 2a_{l_1}, \quad a'_{l_2} > 2a_{l_2}, \ \ldots , \quad a'_{l_{t_3}} > 2a_{l_{t_3}} , \qquad (4.42)$$

и из множителей (4.41) образуем произведения:

$$\mu_3 = \prod_{n=1}^{t_3} P_{l_n}^{a_{l_n}} = \prod_{n=1}^{t_3} \mu_{3n}^{\alpha_{3n}} , \ \ \alpha_{3n} = 1, 2, \ldots , \qquad (4.43а)$$

$$\mu_3' = \prod_{n=1}^{t_3} P_{1_n}^{a_{1_n}'} = \prod_{n=1}^{t_3} \mu_{3n}^{\alpha_{3n}'} \; , \quad \alpha_{3n}' > 2\alpha_{3n} \; . \qquad (4.43б)$$

Если ни один из показателей степени (4.34) не удовлетворяет условиям (4.42), то будем полагать $\mu_3 = 1$, $\mu_3' = 1$.

Множители P, P', параметры $|m_{23}|$, M_2 и разности $M_2 - 2m_{23}^2$, $M_2 - m_{23}^2$ выражаются через произведения (4.37), (4.40), (4.43) формулами:

$$P = \mu_1\mu_2\mu_3 \; , \quad P' = \mu_1'\mu_2{}^2\mu_3' \; ,$$

$$|m_{23}| = 2^{\beta}\mu_1\mu_2\mu_3 \; , \quad M_2 = 2^{\lambda}\mu_1'\mu_2^2\mu_3'M \; , \qquad (4.44)$$

$$M_2 - 2m_{23}^2 = 2^{\lambda}\mu_1'\mu_2^2\mu_3^2 D \; , \qquad (4.45)$$

где

$$D = \rho' M - 2^{2\beta-\lambda+1}\rho \; ; \qquad (4.46)$$

$$M_2 - m_{23}^2 = \mu_1'\mu_2^2\mu_3^2(2^{\lambda}\rho' M - 2^{2\beta}\rho) \; ; \qquad (4.47)$$

$$\rho' = \mu_3' / \mu_3^2 \; ; \qquad (4.48а)$$

$$\rho = \mu_1^2 / \mu_1' \; . \qquad (4.48б)$$

Разность в правой части формулы (4.47) представим в виде произведения

$$2^{\lambda}\rho' M - 2^{2\beta}\rho = 2^{\delta}\mu_2'\Delta \qquad (4.49)$$

взаимно простых множителей 2, μ_2', Δ, где

$$\mu_2' = \begin{cases} \prod_{n=1}^{t_2} \mu_{2n}^{\gamma_{2n}}, & \gamma_{2n} = 0, 1, 2, \dots , \quad \text{если } \mu_2 \neq 1, \\ 1, & \text{если } \mu_2 = 1, \end{cases} \qquad (4.50а)$$

$$\Delta = \prod_{n=1}^{t} \Delta_n^{\gamma_n}, \quad \gamma_n = 1, 2, \dots \; ; \qquad (4.50б)$$

$\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_t$ – простые нечетные числа.

Тогда будем иметь

$$M_2 - m_{23}^2 = m_{21}^2 + m_{22}^2 = 2^{\delta}\mu_1'\mu_2^2\mu_2'\mu_3^2\Delta \; . \qquad (4.51)$$

Целочисленный показатель степени δ при множителе 2 принимает значения

$$\delta = \begin{cases} 0, & \text{если } \beta = 0, \; \lambda = 1, \\ 1, & \text{если } \beta = 1, 2, 3, \dots , \; \lambda = 1, \\ 2, & \text{если } \beta = 2, 3, 4, \dots , \; \lambda = 2. \end{cases} \qquad (4.52)$$

Несколько сложнее обстоит дело при $\beta = 1$, $\lambda = 2$. Таким β и λ соответствует вектор $\mathbf{X}_2$, целочисленная координата m_{23} которого – удвоенное нечетное число, а целочисленные координаты m_{21}, m_{22} – либо удвоенные нечетные числа, либо учетверенные целые числа (см. формулы (3.99а), (3.99б)), т. е.

$$m_{21} = 2^{\beta_{21}} m'_{21}, \quad m_{22} = 2^{\beta_{22}} m'_{22}, \tag{4.53а}$$

если $m_{21} \neq 0$, $m_{22} \neq 0$, где $\beta_{21}, \beta_{22} = 2, 3, 4, \ldots$ при $\beta_{21} \neq \beta_{22}$ и $\beta_{21}, \beta_{22} = 1, 2, 3, \ldots$ при $\beta_{21} = \beta_{22}$; m'_{21}, m'_{22} – нечетные целые числа;

$$m_{21} = 0, \; m_{22} = 2^{\beta_{22}} m'_{22}, \tag{4.53б}$$

где $\beta_{22} = 2, 3, 4, \ldots$; m'_{22} – нечетное целое число;

$$m_{21} = 2^{\beta_{21}} m'_{21}, \quad m_{22} = 0, \tag{4.53в}$$

где $\beta_{21} = 2, 3, 4, \ldots$; m'_{21} – нечетное целое число, если одна из координат m_{21}, m_{22} равна нулю.

Учитывая это, легко видеть, что показатель степени δ в (4.51) принимает значения

$$\delta = \begin{cases} 2\beta_{21}, & \text{если } \beta_{21} < \beta_{22}, \; \beta_{21} = 2, 3, 4, \ldots, \\ 2\beta_{21} + 1, & \text{если } \beta_{21} = \beta_{22}, \; \beta_{21} = 1, 2, 3, \ldots, \\ 2\beta_{22}, & \text{если } \beta_{22} < \beta_{21}, \; \beta_{22} = 2, 3, 4, \ldots \end{cases} \tag{4.54а}$$

в тех случаях, когда $m_{21} \neq 0$, $m_{22} \neq 0$, и значения

$$\delta = \begin{cases} 2\beta_{21}, & \text{если } m_{22} = 0, \; \beta_{21} = 2, 3, 4, \ldots, \\ 2\beta_{22}, & \text{если } m_{21} = 0, \; \beta_{22} = 2, 3, 4, \ldots \end{cases} \tag{4.54б}$$

в тех случаях, когда одна из координат m_{21}, m_{22} равна нулю.

В дополнение к сказанному отметим, что равенство нулю координаты m_{21}, либо координаты m_{22}, возможно также и при $\beta = 0$, $\lambda = 1$ и при $\beta = 2, 3, 4, \ldots$, $\lambda = 2$. Во всех этих случаях в отношении множителей, входящих в разложения на множители отличных от нуля координат вектора $\mathbf{X}_2$, отвечающего требованию (3.97), самих координат и суммы их квадратов можно утверждать следующее:

$$\mu'_1 = 1, \quad \mu_2 = 1, \quad \mu'_3 = 1, \quad \mu_3 = 1, \tag{4.55.а}$$

$$|m_{2i}| = 2^{\delta/2} \Delta^{1/2}, \quad |m_{23}| = 2^{\beta} \mu_1, \tag{4.55б}$$

$$M_2 = 2^{\lambda} M, \tag{4.55в}$$

где $i = 1$, если $m_{22} = 0$; $i = 2$, если $m_{21} = 0$.

Действительно, любые другие значения m_{2i}, m_{23}, не имеющие общего нечетного делителя и не отвечающие условиям (4.55), равенствам

$$m_{2i}^2 + m_{23}^2 = m_{2i}^2 + 2^{2\beta} \mu_1^2 \mu_2^2 \mu_3^2 = M_2, \quad M_2 = 2^{\lambda} \mu'_1 \mu_2^2 \mu'_3 M,$$

$$M_2 - m_{23}^2 = m_{2i}^2 = 2^{\delta}\mu_1'\mu_2^2\mu_2'\mu_3^2\Delta$$

удовлетворять не могут.

Значения произведений (4.37), (4.40а), (4.43), входящих в разложения на множители значений параметров $|m_{23}|$, M_2, взятых из табл. 3.2, а также значения показателя δ и множителей μ_2', Δ (см. (4.50)) приводятся в табл. 4.1.

Натуральную переменную N_{13} представим в виде функции

$$N_{13} = 2^{\alpha}\mu_1\mu_2''\mu_3 N\ , \tag{4.56}$$

принимая во внимание выводы, сформулированные в прил. 1, и обобщая формулы (П1.13), (П1.21), (П1.26).

В (4.56) явным образом выделены взаимно простые нечетные множители μ_1, μ_2'', μ_3, N, а также множитель 2, показатель степени α при котором принимает целочисленные значения 0, 1, 2, … . Множители μ_1, μ_3 – величины, фиксированные при заданных $|m_{23}|$, M_2, а множитель

$$\mu_2'' = \begin{cases} \prod\limits_{n=1}^{t_2} \mu_{2n}^{\alpha_{2n}''}, & \text{если } \mu_2 \neq 1, \\ 1, & \text{если } \mu_2 = 1 \end{cases} \tag{4.57}$$

как функция целочисленных показателей степени α_{2n}'', $n = 1, 2, \ldots, t_2$ при $\mu_2 \neq 1$ и множитель N – величины переменные, где показатель степени α_{2n}'' принимает:

1) значение

$$\alpha_{2n}'' = \alpha_{2n} \text{ при } \gamma_{2n} = 0\ ; \tag{4.58а}$$

2) значения из интервала

$$\alpha_{2n} - \gamma_{2n} \le \alpha_{2n}'' \le \alpha_{2n} + \gamma_{2n} \text{ при } 1 \le \gamma_{2n} \le \alpha_{2n} - 1 \text{ и } \alpha_{2n} \ge 2\ ; \tag{4.58б}$$

3) значения из интервала

$$0 \le \alpha_{2n}'' \le \alpha_{2n} + \gamma_{2n} \text{ при } \gamma_{2n} \ge \alpha_{2n}\ , \tag{4.58в}$$

если m_{21}, m_{22}, $|k|\beta c$ отличны от нуля (см. формулы (П1.22)).

Формула (4.56) выражает связь между значениями натуральной переменной N_{13} и значениями задаваемых параметров m_{23}, M_2. Роль независимых переменных в (4.56) играют целочисленный показатель степени α при множителе 2, целочисленные показатели степени α_{2n}'', $n = 1, 2, \ldots, t_2$ при простых множителях (4.38), общих для m_{23}, M_2, и нечетная натуральная переменная N. Допустимые значения показателей α_{2n}'', $n = 1, 2, \ldots, t_2$ ограничены сверху в силу требования целочисленности функций (3.75) – (3.78) и требования (3.100). Что же касается переменных α, N, то их значения должны отвечать тем же требованиям и как таковые не могут быть совершенно произвольными и неограниченно большими при заданных m_{23}, M_2.

Зависимость функций (3.75) - (3.78) от переменных α и N исследуется в прил. 2 и 3. Полученные результаты позволяют утверждать следующее:

1) При

$$\beta = 0, \ \lambda = 1, \ \delta = 0 \tag{4.59а}$$

(нечетные m_{23}) выделенными значениями переменной α и параметра $|k|$ будут

$$\alpha = 0, \ |k| = en, \tag{4.59б}$$

$$\alpha = 1, \ |k| = on, \tag{4.59в}$$

где символы en и on используются для обозначения величин, выражаемых соответственно четными и нечетными натуральными числами.

2) При

$$\beta = 1, 2, 3, \ldots, \ \lambda = 1, \ \delta = 1 \tag{4.60а}$$

(четные m_{23} и нечетные m_{21}, m_{22}) выделенным является значение

$$\alpha = \beta, \tag{4.60б}$$

причем при $\beta \geq 2$ следует ограничиться только четными значениями задаваемого параметра $|k|$.

3) При

$$\beta = 2, 3, 4, \ldots, \ \lambda = 2, \ \delta = 2 \tag{4.61а}$$

(четные m_{21}, m_{22}, m_{23}) к выделенным значениям переменной α и параметра $|k|$ относятся значения

$$\alpha = \beta, \ |k| = en. \tag{4.61б}$$

4) При

$$\beta = 1, \ \lambda = 2 \tag{4.62}$$

(m_{23} – удвоенное нечетное число, m_{21}, m_{22} – четные) функции (3.75) не имеют целочисленных значений, удовлетворяющих требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ минимальной длины в соответствующем ему кристаллографическом направлении.

Выделенными значениями нечетной натуральной переменной N являются (см. (П3.2)) значения функции

$$\Delta'' = \prod_{n=1}^{t} \Delta_n^{\alpha_n''}, \quad \alpha_n'' = 0, 1, 2, \ldots \gamma_n, \tag{4.63}$$

ограниченной сверху.

Равенство (П3.2) позволяет исключить N в (4.56) и выразить переменную N_{13} в виде функции

$$N_{13} = 2^{\alpha} \mu_1 \mu_3 N'' \tag{4.64}$$

неотрицательной целочисленной переменной α и функции

$$N'' = \mu_2'' \Delta'' \tag{4.65}$$

натуральных переменных μ_2'' (4.57) и Δ'' (4.63). Каждая из этих переменных при заданных $|m_{23}|$, M_2 принимает конечное число значений в силу формул (4.59) – (4.62) и неравенств

$$1 \le \mu_2'' \le \mu_{2\max}'' , \quad 1 \le \Delta'' \le \Lambda_{\max}'' , \tag{4.66}$$

где

$$\mu_{2\max}'' = \mu_2''\big|_{\alpha_{21}'=\alpha_{21}+\gamma_{21},\ \alpha_{22}'=\alpha_{22}+\gamma_{22},\dots,\ \alpha_{2t_2}'=\alpha_{2t_2}+\gamma_{2t_2}} = \prod_{n-1}^{t_2} \mu_{2n}^{\alpha_{2n}+\gamma_{2n}} = \mu_2 \mu_2' \tag{4.67}$$

(см. формулы (4.57), (4.58), (4.40а), (4.50а)); $\Lambda_{\max}''$ определяется формулой (П3.3).

4.7. Ограничения на допустимые значения переменной N_{13} и задаваемого параметра $|k|$

Значения переменной N_{13}, допустимые с точки зрения требований, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ минимальной длины в соответствующем ему кристаллографическом направлении, должны удовлетворять неравенству

$$N_{13} \le N_u . \tag{4.68}$$

Наибольшее из допустимых значений N_{13} при заданном α выражается формулой

$$N_u = 2^{\alpha} \mu_1 \mu_3 N_{\max}'' , \tag{4.69}$$

где

$$N_{\max}'' = \mu_{2\max}'' \Delta_{\max}'' = \mu_2 \mu_2' \Delta \tag{4.70}$$

(см. (4.65) – (4.67)).

Формулу (4.69) можно преобразовать к виду

$$N_u = 2^{\alpha+\beta-\delta} |m_{23}| \rho F(f) , \tag{4.71}$$

если учесть, что $\mu_1 \mu_3 = 2^{-\beta} |m_{23}| / \mu_2$, $\mu_2' \Delta = 2^{2\beta-\delta} \rho F(f)$, где ρ определяется формулой (4.48б), $F(f)$ – формулой (3.74), $f = m_{23}^2 / M_2$.

Значения натуральной переменной N_{13} ограничены также и снизу (см. неравенства (3.72)), поэтому минимальное значение переменной (4.65) не обязательно равно единице, как это следует из неравенств (4.66). Неравенства (3.72) в сочетании с неравенством (4.68) приводят к ограничениям

$$|k|_{min} \le |k| \le |k|_{max} , \tag{4.72}$$

$$N''_{min} \le N'' \le N''_{max} , \tag{4.73}$$

которым должен подчиняться выбор задаваемого параметра $|k|$ и переменной N''.

Максимальное значение N''_{max} переменной N'' определяется формулой (4.70). Минимальное значение $|k|_{min}$ параметра $|k|$ зависит от β, δ, λ и определяется формулами:

$$|k|_{min} = \begin{cases} 2^{1-\alpha}, & \text{если } \beta = 0,\ \lambda = 1,\ \delta = 0, \\ 1, & \text{если } \beta = 1,\ \lambda = 1,\ \delta = 1, \\ 2, & \text{если } \beta = 2, 3, 4, \dots,\ \lambda = 1,\ \delta = 1, \\ 2, & \text{если } \beta = 2, 3, 4, \dots,\ \lambda = 2,\ \delta = 2, \end{cases} \tag{4.74}$$

(см. формулы (4.59б), (4.59в), (4.61б) и пояснения к формулам (4.60)), а максимальное значение $|k|_{max}$ его и минимальное значение N''_{min} переменной N'' устанавливаются с помощью:

1) неравенств

$$\rho > 2^{\delta-\beta+1-\alpha} |k|_{min} F_1(f) / F(f) , \tag{4.75а}$$

$$|k|_{min} \le |k| < 2^{\beta-\delta+\alpha-1} \rho F(f) / F_1(f) , \tag{4.75б}$$

$$2^{\beta+1-\alpha} |k| \mu_2 F_1(f) < N'' \le 2^{2\beta-\delta} \mu_2 \rho F(f) , \tag{4.75в}$$

если f принадлежит интервалу (3.35а);

2) неравенств

$$\rho \ge 2^{\delta-\beta+1-\alpha} |k|_{min} F_2(f) / F(f) , \tag{4.76а}$$

$$|k|_{min} \le |k| \le 2^{\beta-\delta+\alpha-1} \rho F(f) / F_2(f) , \tag{4.76б}$$

$$2^{\beta+1-\alpha} |k| \mu_2 F_2(f) \le N'' \le 2^{2\beta-\delta} \mu_2 \rho F(f) , \tag{4.76в}$$

если f принадлежит интервалу (3.36а);

3) неравенств

$$\rho \ge 2^{\delta-\beta+1-\alpha} |k|_{min} F_3(f) / F(f) , \tag{4.77а}$$

$$|k|_{min} \le |k| \le 2^{\beta-\delta+\alpha-1} \rho F(f) / F_3(f) , \tag{4.77б}$$

$$2^{\beta+1-\alpha} |k| \mu_2 F_2(f) \le N'' \le 2^{\beta+1-\alpha} |k| \mu_2 F_3(f) , \tag{4.77в}$$

если f принадлежит интервалу (3.37а);

4) неравенств

$$2^{\beta-\delta+\alpha-1} \rho F(f) / F_3(f) < |k| \le 2^{\beta-\delta+\alpha-1} \rho F(f) / F_2(f) , \tag{4.78а}$$

$$2^{\beta+1-\alpha}|k|\mu_2 F_2(f) \le N'' \le 2^{2\beta-\delta}\mu_2 \rho F(f) \qquad (4.78б)$$

при том же f из интервала (3.37а).

Здесь α, ρ, μ_2 определяются соответственно формулами (4.59) – (4.61), (4.48б), (4.40а), а функции $F_1(f)$, $F_2(f)$, $F_3(f)$, F(f) – формулами (3.73), (3.74). Значения этих функций при $f = m_{23}^2/M_2$, где $|m_{23}|$, M_2 указаны в табл. 4.1, а интервалы принадлежности значений f приведены в табл. 4.2.

Неравенства (4.75в), (4.76в), (4.77в), (4.78б) определяют область допустимых значений переменной (4.65), в чем нетрудно убедиться, подставляя (4.64) в неравенства (3.72), (4.64), а (4.71) в неравенство (4.68) и разрешая полученные неравенства совместно неравенствами $F_1(f) > 1$, $F_2(f) > 1$ (см. рис. 3.2) относительно N''.

Таблица 4.2

Значения функций F(f), $F_1(f)$, $F_2(f)$, $F_3(f)$ при $f = m_{23}^2/M_2$ и интервалы (3.35а), (3.36а), (3.37а) принадлежности f

M_2	$\|m_{23}\|$	f	Интервал	F(f)	$F_1(f)$	$F_2(f)$	$F_3(f)$
2	1	1/2	(3.36а)	1	–	3/2	–
22	3	9/22	(3.35а)	13/9	$(17+3\sqrt{61})/20$	–	–
26	3	9/26	(3.35а)	17/9	$(25+3\sqrt{77})/4$	–	–
34	4	8/17	(3.36а)	9/8	–	13/8	–
36	4	4/9	(3.36а)	5/4	–	7/4	–
42	4	8/21	(3.35а)	13/8	$(9+2\sqrt{30})/6$	–	–
50	5	1/2	(3.36а)	1	–	3/2	–
54	5	25/54	(3.36а)	29/25	–	83/50	–
62	5	25/62	(3.35а)	37/25	$(49+5\sqrt{173})/52$	–	–
62	6	18/31	(3.37а)	13/18	–	11/9	13/10
66	5	25/66	(3.35а)	41/25	$(57+15\sqrt{21})/36$	–	–
68	6	9/17	(3.37а)	8/9	–	25/18	4
70	5	5/14	(3.35а)	9/5	$(13+\sqrt{205})/4$	–	–
70	6	18/35	(3.37а)	17/18	–	13/9	17/2
74	5	25/74	(3.35а)	49/25	$(73+5\sqrt{221})/4$	–	–

Неравенства (4.75б), (4.76б), (4.77б), (4.78а) выражают условия непротиворечивости неравенств (4.75в), (4.76в), (4.77в), (4.78б), а неравенства (4.75а), (4.76а), (4.77а) – условия непротиворечивости неравенств (4.75б), (4.76б), (4.77б).

4.8. Ограничения на выбор задаваемых векторов X_2 в случае прямоугольных решеток ξ^2

Условия совместимости вектора ξ_2 решетки ξ^2 с вектором $\mathbf{X}_2$ решетки γ связывают значение отношения $f = m_{23}^2 / M_2$, известное при заданном $\mathbf{X}_2$, с одним из числовых интервалов (3.35а), (3.36а), (3.37а). Условия совместимости вектора $\xi_1(\mathbf{X}_2)$ решетки ξ^2 с вектором решетки γ, имеющим минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, подчиняют выбор вектора $\mathbf{X}_2$ дополнительным ограничениям.

Одно из них (см. комментарий к формулам (4.62)) исключает векторы $\mathbf{X}_2$, целочисленная координата m_{23} которых выражается удвоенным нечетным числом, а координаты m_{21}, m_{22} – четными числами ($\beta = 1$, $\lambda = 2$). Примерами таких векторов могут служить векторы

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 4\,4\,\underline{6} >_\gamma / 2 ,$$

соответствующие узлам координационной сферы с номером $N_{кс}$=32 (см. табл. 3.2).

Другие ограничения следуют из неравенств (4.75а), (4.76а), (4.77а) в зависимости от интервала принадлежности f, но относятся уже не к f непосредственно, а к нечетным натуральным ρ и z, где

$$z = \rho' M , \tag{4.79}$$

которые строятся из множителей, входящих в разложения на множители задаваемых параметров m_{23} и M_2 (см. формулы (4.48), (4.44)), и через которые f выражается формулой

$$f = 2^{2\beta-\lambda} \rho / z , \tag{4.80}$$

Пусть f принадлежит интервалу (3.35а). Исключая f в (3.35а), (4.75а) с помощью (4.80) и разрешая полученные неравенства относительно ρ и z, будем иметь

$$\rho_1 < \rho < \rho_2' , \tag{4.81а}$$

$$z > q / A_+ , \tag{4.81б}$$

где

$$\rho_1 = 2^{\lambda-2\beta}(4z + 3q - \sqrt{4z^2 - 3q^2}) / 6 ; \tag{4.82а}$$

$$\rho_2' = 2^{\lambda-2\beta+(2/3)}(2^{1/3}-1)z \; ; \tag{4.82б}$$

$$q = 2^{\beta-\lambda+\delta-\alpha}|k|_{min} = \begin{cases} 2^{-2\alpha}, & \text{если } \beta=0,\ \lambda=1,\ \delta=0, \\ 1, & \text{если } \beta=1,\ \lambda=1,\ \delta=1, \\ 2, & \text{если } \beta=2,3,4,\ \ldots,\ \lambda=1,\ \delta=1, \\ 2, & \text{если } \beta=2,3,4,\ \ldots,\ \lambda=2,\ \delta=2; \end{cases} \tag{4.83}$$

$$A_+ = (2^{1/3}-1)(2^{2/3}-1) \; .$$

Заданное наперед нечетное натуральное число n_0 удовлетворяет неравенствам (4.81а), если

$$\beta > \beta_0 = \frac{1}{2}\left\{\lambda + \frac{\ln q - \ln[n_0(1-2^{-2/3})]}{\ln 2}\right\} \tag{4.84а}$$

и найдутся нечетные натуральные z, удовлетворяющие неравенствам

$$z' < z < z'' \; , \tag{4.84б}$$

где

$$z' = 2^{2\beta-\lambda-(2/3)} n_0 / (2^{1/3}-1) \; ; \tag{4.85а}$$

$$z'' = 2^{2\beta-\lambda}\left[2n_0 + \sqrt{n_0(n_0 - 2^{\lambda-2\beta}q)}\;\right] - q \; . \tag{4.85б}$$

Так, значение $n_0 = 1$ отвечает условию (4.84а) при $\beta = 2$, $\lambda = 1$, поскольку $\beta_0|_{\lambda=1,\, n_0=1} \approx 1{,}7$, но в этом случае не существует нечетных натуральных z, удовлетворяющих неравенствам (4.84б), поскольку имеем $z'|_{\beta=2,\, \lambda=1,\, n_0=1} \approx 19{,}4$, $z''|_{\beta=2,\, \lambda=1,\, n_0=1} \approx 20{,}9$.

Следовательно, векторы $\mathbf{X}_2$, которым соответствуют f из интервала (3.35а), $\beta = 2$, $\lambda = 1$, $\rho = 1$, и в частности векторы $\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 1\,5\,\underline{4} >_\gamma / 2$ (см. табл. 4.2, табл. 3.1, табл. 3.2), ограничениям (4.81) удовлетворять не могут и должны исключаться из рассмотрения.

При $\beta = 0$, $\lambda = 1$ условию (4.84а) отвечают $n_0 \geq 3$, если $\alpha = 1$, и $n_0 \geq 7$, если $\alpha = 0$, но нечетные натуральные z, удовлетворяющие неравенствам (4.84б), существуют не всегда, о чем свидстельствуют данные табл. 4.3 относительно границ (4.85) интервала (4.84б). Поэтому векторы $\mathbf{X}_2$, которым соответствуют f из интервала (3.35а), $\beta = 0$, $\lambda = 1$, разделяются на две группы. Первую образуют векторы, удовлетворяющие ограничениям (4.81), только при $\alpha = 1$. К ней относятся, в частности, векторы:

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 1\,4\,\underline{3} >_\gamma / 2 \quad (\rho = 9, z = 13) \, ,$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 3\,6\,\underline{5} >_\gamma /2 \quad (\rho = 5, z = 7), \tag{4.86а}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 0\,7\,\underline{5} >_\gamma /2 \quad (\rho = 25, z = 37).$$

Таблица 4.3

Границы интервала, содержащего значения нечетного натурального z

n_o	z'	$z''\vert_{\alpha=0}$	$z''\vert_{\alpha=1}$
3	3,64	–	4,12
5	6,06	–	7,12
7	8,48	8,96	10,12
9	10,91	11,97	13,12
11	13,33	14,97	16,12
13	15,75	17,98	19,12
15	18,18	20,98	22,12
17	20,60	23,98	25,12
19	23,02	26,99	28,12
21	25,45	29,99	31,12
23	27,87	32,99	34,12
25	30,30	35,99	37,12

Вторую группу образуют векторы, удовлетворяющие ограничениям (4.81) при $\alpha = 0, 1$. К этой группе относятся векторы:

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 2\,3\,\underline{3} >_\gamma /2 \quad (\rho = 9, z = 11),$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 1\,6\,\underline{5} >_\gamma /2 \quad (\rho = 25, z = 31), \tag{4.86б}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 4\,5\,\underline{5} >_\gamma /2 \quad (\rho = 25, z = 33).$$

Пусть f принадлежит интервалу (3.36а). Тогда неравенства (3.36а) и неравенство (4.76а), следующие из второго условия совместимости, подчиняют множители ρ и z, соответствующие задаваемому вектору $\mathbf{X}_2$, ограничениям, которые выражаются неравенствами:

$$\rho_1' < \rho \le \rho_2', \tag{4.87а}$$

$$z \ge z_{min}, \tag{4.87б}$$

где

$$\rho_1' = 2^{\lambda-2\beta+1}(1 - 2^{-1/3})z, \quad \rho_2' = 2^{\lambda-2\beta-1}z; \tag{4.88}$$

$$z_{\min} = \begin{cases} 7-4\alpha, & \text{если } \beta=0,\ \lambda=1,\ \alpha=0,1, \\ 13, & \text{если } \beta=1,\ \lambda=1,\ \alpha=\beta, \\ 2^{2\beta}+1, & \text{если } \beta=2,3,\ \dots,\ \lambda=1,\ \alpha=\beta, \\ 25, & \text{если } \beta=2,\ \lambda=2,\ \alpha=\beta, \\ 2^{2\beta-1}+1, & \text{если } \beta=3,4,\ \dots,\ \lambda=2,\ \alpha=\beta. \end{cases} \quad (4.89)$$

Минимальное значение $\rho = 1$ удовлетворяет неравенствам (4.87а) в двух случаях:

1) при $\beta = 2, 3, \dots,\ \lambda = 1,\ \alpha=\beta$, если

$$1 + 2^{2\beta} \le z < 2^{2(\beta-1)}/(1-2^{-1/3}) \ ; \quad (4.90а)$$

2) при $\beta = 3, 4, \dots,\ \lambda = 2,\ \alpha=\beta$, если

$$1 + 2^{2\beta-1} \le z < 2^{2\beta-3}/(1-2^{-1/3}) \ . \quad (4.90б)$$

Отсюда следует, что все векторы $\mathbf{X}_2$, целочисленные координаты которых отвечают условию $f=1/2$, и в частности векторы $\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 0 1 \underline{1} >_\gamma /2$, $\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 3 4 \underline{5} >_\gamma /2$ (см. табл. 3.2), должны исключаться из рассмотрения [1]. Действительно, равенство $m_{23}^2/M_2 = 1/2$ имеет место только при $|m_{23}| = \mu_2$, $M_2 = 2\mu_2^2$ (см. формулы (4.44)). Таким $|m_{23}|$, M_2 соответствуют $\beta = 0$, $\lambda = 1$, $\rho = 1$, $z = 1$ (поскольку $\mu_1 = \mu_1' = 1$, $\mu_3 = \mu_3' = 1$, $M = 1$), не удовлетворяющие ограничениям (4.87).

Что же касается других векторов из табл. 4.2, то значения f, принадлежащие интервалу (3.36а), характерны для векторов еще трех семейств:

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 2 4 \underline{4} >_\gamma /2 \quad (\beta = 2,\ \lambda = 2,\ \rho = 1,\ z = 9),$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 3 3 \underline{4} >_\gamma /2 \quad (\beta = 2,\ \lambda = 1,\ \rho = 1,\ z = 17), \quad (4.91а)$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 2 5 \underline{5} >_\gamma /2 \quad (\beta = 0,\ \lambda = 1,\ \rho = 25,\ z = 27). \quad (4.91б)$$

Однако ограничениям (4.87) отвечают только векторы семейств (4.91).

Пусть f принадлежит интервалу (3.37а). Исключая f в (3.37а), (4.77а) с помощью (4.80) и разрешая полученные неравенства относительно ρ и z, будем иметь

$$\rho_1 \le \rho < \rho_2', \quad z > (3 + 2\sqrt{2})q \ , \quad (4.92)$$

где

$$\rho_1 = 2^{\lambda-2\beta-1}(z+q) \ ; \quad \rho_2' = 2^{\lambda-2\beta}(2-\sqrt{2})z \ ; \quad (4.93)$$

q определяется формулами (4.83).

---

[1] Результаты исследования кристаллографии решеток ξ^2 в плоскостях Π_3 семейства $\{lhh\}_\gamma$ подтверждают этот вывод в отношении векторов $\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 0 1 \underline{1} >_\gamma /2$.

К этому случаю относятся, в частности, векторы:

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 1\,5\,\underline{6} >_\gamma /2 \quad (\beta = 1,\ \lambda = 1,\ \rho = 9, z = 31), \tag{4.94а}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 3\,5\,\underline{6} >_\gamma /2 \quad (\beta = 1,\ \lambda = 1,\ \rho = 9, z = 35). \tag{4.94б}$$

Векторы (4.94) отвечают ограничениям (4.92), поскольку значение $\rho = 9$ и $z \geq 31$ удовлетворяют неравенствам (4.92) при $\beta = 1$, $\lambda = 1$.

4.9. Прямоугольные решетки ξ^2 при векторах X_2, ограниченных тридцать пятой координационной сферой решетки γ

Задача о разрешимости уравнений (3.75) в целых числах, отвечающих требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, и требованию (3.100), сводится к задаче о разрешимости в целых числах уравнений:

$$\tilde{\xi}_1 = 2^{\lambda+\alpha-\beta} M\mu_1'\mu_3' N''(2^{\alpha-\beta} N'' + |k|\mu_2), \tag{4.95}$$

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k (2^{\beta+\alpha-\delta} m_{21}\rho + s\eta m_{22} R'')/n'', \tag{4.96а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k (2^{\beta+\alpha-\delta} m_{22}\rho - s\eta m_{21} R'')/n'', \tag{4.96б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\alpha} \eta_k s\eta \mu_1 \mu_3 N'', \tag{4.96в}$$

$$|k|\beta c = 2^{\delta} \mu_1' \mu_2 \mu_3^2 N'' R'', \tag{4.97}$$

$$R'' = \sqrt{2^{\lambda-\delta+\alpha-\beta} z (2^{\lambda-\delta+\alpha-\beta} D + |k| n'')}, \tag{4.98}$$

где

$$n'' = \mu_2 \mu_2' \Delta / N'', \tag{4.99}$$

в зависимости от допустимых значений переменных α, N'' и параметра $|k|$ (см. формулы (4.59) – (4.61), (4.72) – (4.78)) при заданном $\mathbf{X}_2$.

Целочисленные координаты задаваемого вектора $\mathbf{X}_2$ должны отвечать требованию (3.97), ограничениям, указанным в п. 4.8, и ограничениям (4.81), (4.82), (4.87) – (4.90), (4.92), (4.93).

Нечетное натуральное z (см. (4.79)) удобно разложить в произведение

$$z = \tilde{z}^2 \bar{z}, \tag{4.100}$$

где $\tilde{z}^2$ – произведение простых нечетных чисел, взятых в четных степенях, а $\bar{z}$ – произведение простых нечетных чисел, взятых в степени «ноль» или «единица», и преобразовать (4.98) к виду

$$R'' = \tilde{z}\bar{z}\Phi \ , \qquad (4.101)$$

где

$$\Phi = \sqrt{2^{\lambda-\delta+\alpha-\beta}(2^{\lambda-\delta+\alpha-\beta}D + |k|n'')/\bar{z}} \ . \qquad (4.102)$$

Из (4.101) следует, что радикал (4.98) и уравнение (4.97) разрешимы в неотрицательных целых числах, если множитель $\bar{z}$ в знаменателе формулы (4.102) сократим. Это условие выполнимо только при взаимно простых $|k|$ и $\bar{z}$, поскольку D и $\bar{z}$, n'' и $\bar{z}$ – взаимно простые.

Координаты (П1.10) вектора (П1.11), координаты вектора нормали

$$N'_3 = \left.\frac{\eta_k s\eta[\xi_1(\mathbf{X}_2), \xi_2]}{n'_3(a_\gamma/2)^2}\right|_{\xi_2=\mathbf{X}_2} = \sum_{i=1}^{3} N'_{3i}\mathbf{e}_i^\gamma \ , \qquad (4.103)$$

(ненормированного) к ориентационно неизменной плоскости Π_3, содержащей решетку ξ^2, построенную на ортогональных векторах $\xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\xi_2 = \mathbf{X}_2$, и геометрические характеристики $\gamma \to \alpha$ преобразования выражаются через переменные α, N'', соответственно, формулами:

$$\zeta_1 = 2^\beta \mu_1\mu_2\mu_3\tilde{z}\bar{z}(2^{\lambda-\delta+\alpha-\beta}m_{21}\tilde{z} + s\eta m_{22}\Phi)/n'' \ , \qquad (4.104а)$$

$$\zeta_2 = 2^\beta \mu_1\mu_2\mu_3\tilde{z}\bar{z}(2^{\lambda-\delta+\alpha-\beta}m_{22}\tilde{z} - s\eta m_{21}\Phi)/n'' \ , \qquad (4.104б)$$

$$\zeta_3 = 0 \ ,$$

$$N'_{31} = -\zeta_2/n'_3 \ , \quad N'_{32} = \zeta_1/n'_3 \ , \qquad (4.105а)$$

$$N'_{33} = 2^\delta \mu'_1\mu_2\mu_3^2\tilde{z}\bar{z}\Phi N''/n'_3 \ , \qquad (4.105б)$$

$$\kappa = \sqrt{[1 + 2^{\beta-\alpha}|k|(\mu_2/N'')]/2} \ , \qquad (4.106а)$$

$$\tau = \sqrt{2\left[1 - \frac{|k|\mu_2}{f(2^{\alpha-\beta}N'' + |k|\mu_2)}\right]} \ . \qquad (4.106б)$$

Общий делитель n'_3 в формулах (4.103), (4.105) выбирается так, чтобы значения координат N'_{31}, N'_{32}, N'_{33}, целочисленные при целочисленных $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$, не имели общего множителя.

Переменные α, N'' и параметр $|k|$, входящие в уравнения (4.95) – (4.97), принимают конечные множества значений, поэтому те из них, которым соответствуют целочисленные значения радикала (4.98) и функций (4.96), могут быть найдены путем прямых вычислений. Результаты таких вычислений в случае векторов, выбираемых из выделенных в п. 4.8 семейств векторов (4.86), (4.91), (4.94), приводятся в табл. 4.4, 4.5.

Таблица 4.4

Допустимые значения параметра $|k|$ и переменных α, N'' при нечетных m_{23} ($\beta = 0$, $\lambda = 1$, $\delta = 0$)

M_2	$\lvert m_{23}\rvert$	D	α	$\lvert k\rvert_{min}$	$\lvert k\rvert_{max}$	$\lvert k\rvert$	N''_{min}	N''_{max}	N''	R''
22	3	2	0	2	2	2	9	13	13	$2\sqrt{33}$
			1	1	5	1	3	13	13	$6\sqrt{11}$
						3	7			22
						5	11			$2\sqrt{143}$
26	3	4	1	1	1	1	13	17	17	$2\sqrt{221}$
54	5	2	0	2	8	2	7	29	29	18
						4	15			$12\sqrt{3}$
						8	27			$18\sqrt{2}$
			1	1	17	1	3	29	29	$18\sqrt{3}$
						5	9			$6\sqrt{39}$
						7	13			$18\sqrt{5}$
						11	19			$6\sqrt{57}$
						13	23			$18\sqrt{7}$
						17	29			$30\sqrt{3}$
62	5	6	0	2	8	2	9	37	37	$2\sqrt{217}$
						4	19			$4\sqrt{62}$
						6	27			$6\sqrt{31}$
						8	37			$2\sqrt{310}$
			1	1	15	1	3			$10\sqrt{31}$
						3	7			$6\sqrt{93}$
						5	13			$2\sqrt{899}$
						7	17			62
						9	21			$2\sqrt{1023}$
						11	25			$2\sqrt{1085}$
						13	29			$2\sqrt{1147}$
						15	35			$2\sqrt{1209}$
66	5	8	0	2	4	2	15	41	41	$6\sqrt{33}$
						4	29			$2\sqrt{330}$
			1	1	11	1	5	41	41	66
						5	19			$2\sqrt{1221}$
						7	25			$6\sqrt{143}$
						11	39			$2\sqrt{1419}$
70	5	2	1	1	1	1	7	9	9	$6\sqrt{7}$
74	5	12	1	1	1	1	37	49	49	$14\sqrt{37}$

Таблица 4.5

Допустимые значения параметра $|\mathbf{k}|$ и переменных α, N''
при четных m_{23} и нечетных m_{21}, m_{22} ($\beta = 1, 2, \ldots$, $\lambda = 1$, $\delta = 1$, $\alpha = \beta$)

M_2	$\lvert m_{23}\rvert$	D	α	$\lvert k\rvert_{min}$	$\lvert k\rvert_{max}$	$\lvert k\rvert$	N''_{min}	N''_{max}	N''	R''
34	4	1	2	2	2	2	7	9	9	$\sqrt{51}$
62	6	–5	1	1	5	5	13	13	13	0
70	6	–1	1	1	5	1	3	17	17	0
						2	7			$\sqrt{35}$
						3	9			$\sqrt{70}$
						4	13			$\sqrt{105}$

Из табл. 4.4, 4.5 следует, что радикал (4.98), а стало быть и функции (4.96) имеют целочисленные значения только при $M_2 = 22, 54, 62, 66, 70$, т. е. в случае узлов решетки γ, принадлежащих координационным сферам с номерами $N_{кс} = 11, 26, 29, 31, 33$ (см. табл. 3.2). Целочисленные координаты векторов $\mathbf{X}_2$, определяющих положение узлов на этих координационных сферах, приводятся в табл. 4.6 и задаются с использованием переменных $\eta' = \pm 1$, $s\eta = \pm 1$.

В табл. 4.6 приводятся также значения целочисленных координат $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ векторов $\boldsymbol{\xi}_1(\mathbf{X}_2)$, соответствующих векторам $\mathbf{X}_2$ (4.86б), (4.91б), (4.94). Каждый из этих векторов $\boldsymbol{\xi}_1(\mathbf{X}_2)$ является вектором решетки γ, имеющим минимальную длину в соответствующем ему направлении, и вместе с вектором $\boldsymbol{\xi}_2 = \mathbf{X}_2$ образует базис двухмерной решетки ξ^2, лежащей в ориентационно неизменной плоскости Π_3.

Координаты вектора нормали (4.103) к плоскости Π_3 при целочисленных $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ принимают целочисленные значения, не имеющие общего множителя (см. табл. 4.6), однако, взятые попарно, взаимно простыми могут и не быть (см. формулы (4.105а), (4.104)). В частности, именно так обстоит дело с координатами N'_{31}, N'_{32} векторов нормалей к плоскостям Π_3, содержащим какой-либо из векторов семейств (4.86б), (4.91б).

Таблица 4.6

Целочисленные координаты задаваемых векторов $\mathbf{X}_2$ и векторов $\xi_1(\mathbf{X}_2)$

M_2	m_{21}	m_{22}	m_{23}	$\tilde{\xi}_{11}$	$\tilde{\xi}_{12}$	$\tilde{\xi}_{13}$	Π_3			$\mathbf{X}'(\mathbf{X}_2)$	κ	τ
							N'_{31}	N'_{32}	N'_{33}			
22	$2\eta'$ $2\eta'$ $3s\eta\eta'$ $\bar{3}s\eta\eta'$	$3s\eta\eta'$ $\bar{3}s\eta\eta'$ $2\eta'$ $2\eta'$	$\bar{3}s\eta$	$102\eta_k\eta'$ $\overline{30}\eta_k\eta'$ $98\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{10}\eta_k s\eta\eta'$	$10\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{98}\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{30}\eta_k\eta'$ $102\eta_k\eta'$	$78\eta_k s\eta$	$\overline{12}s\eta\eta'$ $24s\eta\eta'$ $\bar{3}\eta'$ $\overline{21}\eta'$	$21\eta'$ $3\eta'$ $24s\eta\eta'$ $\overline{12}s\eta\eta'$	13	$[14\ \ 8s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[2\ \ 16s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[16s\eta\ \ 2\ \ 0]_\gamma$ $[\bar{8}s\eta\ \ 14\ \ 0]_\gamma$	$\sqrt{377}/26$	$\sqrt{130/87}$
54	$2\eta'$ $2\eta'$ $5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$	$5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$ $2\eta'$ $2\eta'$	$\bar{5}s\eta$	$140\eta_k\eta'$ $\overline{40}\eta_k\eta'$ $161\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{89}\eta_k s\eta\eta'$	$89\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{161}\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{40}\eta_k\eta'$ $140\eta_k\eta'$	$145\eta_k s\eta$	$\overline{65}s\eta\eta'$ $85s\eta\eta'$ $\bar{5}\eta'$ $\overline{55}\eta'$	$55\eta'$ $5\eta'$ $85s\eta\eta'$ $\overline{65}s\eta\eta'$	29	$[11\ \ 13s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[1\ \ \overline{17}s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[17s\eta\ \ 1\ \ 0]_\gamma$ $[\overline{13}s\eta\ \ 11\ \ 0]_\gamma$	$\sqrt{31/58}$	$\frac{1}{5}\sqrt{\frac{1334}{31}}$
62	η' η' $6s\eta\eta'$ $\bar{6}s\eta\eta'$	$6s\eta\eta'$ $\bar{6}s\eta\eta'$ η' η'	$\bar{5}s\eta$	$422\eta_k\eta'$ $\overline{322}\eta_k\eta'$ $362\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{238}\eta_k s\eta\eta'$	$238\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{362}\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{322}\eta_k\eta'$ $422\eta_k\eta'$	$370\eta_k s\eta$	$\overline{55}s\eta\eta'$ $65s\eta\eta'$ $20\eta'$ $\overline{40}\eta'$	$40\eta'$ $\overline{20}\eta'$ $65s\eta\eta'$ $\overline{55}s\eta\eta'$	37	$[16\ \ \overline{22}s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[\bar{8}\ \ \overline{26}s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[26s\eta\ \ \bar{8}\ \ 0]_\gamma$ $[\overline{22}s\eta\ \ 16\ \ 0]_\gamma$	$9\sqrt{37}/74$	$\sqrt{3182}/45$

Окончание табл. 4.6

M_2	m_{21}	m_{22}	m_{23}	$\tilde{\xi}_{11}$	$\tilde{\xi}_{12}$	$\tilde{\xi}_{13}$	Π_3			$X'(X_2)$	κ	τ
							N'_{31}	N'_{32}	N'_{33}			
66	$4\eta'$ $4\eta'$ $5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$	$5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$ $4\eta'$ $4\eta'$	$\bar{5}s\eta$	$530\eta_k\eta'$ $\overline{130}\eta_k\eta'$ $514\eta_k s\eta\eta'$ $14\eta_k s\eta\eta'$	$\overline{14}\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{514}\eta_k s\eta\eta'$ $130\eta_k\eta'$ $530\eta_k\eta'$	$410\eta_k s\eta$	$\overline{30}s\eta\eta'$ $70s\eta\eta'$ $\overline{15}\eta'$ $\overline{65}\eta'$	$65\eta'$ $15\eta'$ $70s\eta\eta'$ $30s\eta\eta'$	41	$[26\ \ 12s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[6\ \ 28s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[28s\eta\ \ 6\ \ 0]_\gamma$ $[\overline{12}s\eta\ \ 26\ \ 0]_\gamma$	$\sqrt{3403}/82$	$\frac{1}{5}\sqrt{\frac{4018}{83}}$
62	η' η' $5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$	$5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$ η' η'	$\bar{6}s\eta$	$18\eta_k\eta'$ $18\eta_k\eta'$ $90\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{90}\eta_k s\eta\eta'$	$90\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{90}\eta_k s\eta\eta'$ $18\eta_k\eta'$ $18\eta_k\eta'$	$78\eta_k s\eta$	$\bar{5}s\eta$ $5s\eta$ $\bar{1}$ $\bar{1}$	1 1 $5s\eta$ $\bar{5}s\eta$	0	$[1\ \ 5s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[1\ \ \bar{5}s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[5s\eta\ \ 1\ \ 0]_\gamma$ $[\bar{5}s\eta\ \ 1\ \ 0]_\gamma$	$3/\sqrt{13}$	$\sqrt{338}/18$
70	$3\eta'$ $3\eta'$ $5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$	$5s\eta\eta'$ $\bar{5}s\eta\eta'$ $3\eta'$ $3\eta'$	$\bar{6}s\eta$	$54\eta_k\eta'$ $54\eta_k\eta'$ $90\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{90}\eta_k s\eta\eta'$	$90\eta_k s\eta\eta'$ $\overline{90}\eta_k s\eta\eta'$ $54\eta_k\eta'$ $54\eta_k\eta'$	$102\eta_k s\eta$	$\bar{5}s\eta$ $5s\eta$ $\bar{3}$ $\bar{3}$	3 3 $5s\eta$ $\bar{5}s\eta$	0	$[3\ \ 5s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[3\ \ \bar{5}s\eta\ \ 0]_\gamma$ $[5s\eta\ \ 3\ \ 0]_\gamma$ $[\bar{5}s\eta\ \ 3\ \ 0]_\gamma$	$3/\sqrt{17}$	$\sqrt{578}/18$

Значения их разложимы в произведения $N'_{31} = n_{12}N''_{31}$, $N'_{32} = n_{12}N''_{32}$, где n_{12} – общий множитель, отличный от единицы и зависящий от $\mathbf{X}_2$, а N''_{31}, N''_{32} – взаимно простые целые числа. Учитывая это, каждой из таких плоскостей Π_3 можно поставить в соответствие вектор

$$\mathbf{X}'(\mathbf{X}_2) = 2^{\nu} a_{\gamma}(N''_{32}\mathbf{e}_1^{\gamma} - N''_{31}\mathbf{e}_2^{\gamma})/2 , \qquad (4.107а)$$

где $\nu = 0$, если N''_{31}, N''_{32} – нечетные, и $\nu = 1$, если одна из координат N''_{31}, N''_{32} – четное число, а другая – нечетное.

Вектор (4.107а) является вектором решетки γ и принадлежит той же плоскости Π_3, что и векторы $\xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\xi_2 = \mathbf{X}_2$. Длина его, судя по данным табл. 4.6, где векторы $\mathbf{X}'(\mathbf{X}_2)$ приведены в единицах $a_{\gamma}/2$, меньше, чем длина вектора $\xi_1(\mathbf{X}_2)$. Поэтому двухмерная решетка узлов ξ^2, построенная в каждой из плоскостей Π_3 на векторах $\xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\xi_2 = \mathbf{X}_2$, где $\mathbf{X}_2$ – вектор из семейства векторов (4.86б), (4.91б), будет лишь подрешеткой двухмерной решетки γ^2, образуемой узлами решетки γ, принадлежащими плоскости Π_3[1].

Не являются исключением в этом отношении и решетки ξ^2 в плоскостях Π_3, содержащих любой из векторов семейств (4.94), поскольку каждой из них принадлежат:

1) вектор решетки γ

$$\mathbf{X}'(\mathbf{X}_2) = a_{\gamma}(N'_{32}\mathbf{e}_1^{\gamma} - N'_{31}\mathbf{e}_2^{\gamma})/2 , \qquad (4.107б)$$

где N'_{31}, N'_{32} – взаимно простые нечетные числа (см. табл. 4.6),

2) вектор

$$\mathbf{X}''(\mathbf{X}_2) = a_{\gamma}\mathbf{e}_3^{\gamma} ,$$

такой что $|\mathbf{X}'(\mathbf{X}_2)|, |\mathbf{X}''(\mathbf{X}_2)| < |\xi_1(\mathbf{X}_2)|, |\xi_2| = |\mathbf{X}_2|$.

Следовательно, ни одна из ориентационно неизменных плоскостей Π_3, указанных в табл. 4.6, не может быть реализована как инвариантная плоскость.

Заключительные замечания

Разрешимость уравнений (4.95) – (4.98) в классе инвариантных относительно $\gamma \to \alpha$ преобразования направлений, отождествляемых с направ-

---

[1] При переносе на вектор $\mathbf{X}'(\mathbf{X}_2)$ решетка ξ^2 не совмещается сама с собой.

лениями (3.14) векторов $\mathbf{X}_2$ решетки γ, выделенных условиями совместимости базисных векторов

$$\xi_1 = \xi_1(\mathbf{X}_2),\ \xi_2 = \mathbf{X}_2$$

прямоугольной решетки ξ^2 с векторами решетки γ минимальной длины в соответствующих им кристаллографических направлениях, подтверждается результатами прямых вычислений и предполагает определенные значения геометрических характеристик κ, τ (см. формулы (3.31), (3.71), (4.106)) $\gamma \to \alpha$ преобразования.

Среди найденных прямоугольных решеток ξ^2 (см. табл. 4.6) имеются такие, узлы которых располагаются в ориентационно неизменных плоскостях Π_3, не очень заметно отличающихся от габитусных плоскостей кристаллов α-мартенсита, наблюдаемых в сплавах железа при $\gamma \to \alpha$ мартенситном превращении.

Так, плоскость $\Pi_3 = (\overline{12}s\eta\eta'\ 21\eta'\ 13)_\gamma$, например, составляет угол, приблизительно равный 5,4 градуса с плоскостью $(\bar{5}s\eta\eta'\ 7\eta'\ 5)_\gamma$, близкой к габитусной плоскости кристаллов мартенсита малоуглеродистых сталей. Плоскости $\Pi_3 = (24s\eta\eta'\ 3\eta'\ 13)_\gamma$, $\Pi_3 = (65s\eta\eta'\ 20\eta'\ 37)_\gamma$, $\Pi_3 = (70s\eta\eta'\ 15\eta'\ 41)_\gamma$ составляют углы, приблизительно равные 4,76, 4,02, 1,38 градуса с плоскостями $(9s\eta\eta'\ 2\eta'\ 5)_\gamma$, $(9s\eta\eta'\ \bar{2}\eta'\ 5)_\gamma$, $(9s\eta\eta'\ 2\eta'\ 5)_\gamma$, близкими к габитусным плоскостям α-мартенсита систем Fe-C, Fe-Ni (1,4 – 1,8 вес. % C, 29 – 34 % Ni).

Установлено также (см. п. 4.4) существование прямоугольных решеток ξ^2, узлы которых располагаются в ориентационно неизменных плоскостях $\{5\ 2\ \underline{2}\}_\gamma$, близких к габитусным плоскостям кристаллов α-мартенсита среднеуглеродистых сталей.

Ни одна из найденных ориентационно неизменных плоскостей не реализуема как инвариантная плоскость, поскольку двумерная решетка γ^2, образованная узлами решетки γ, принадлежащими каждой из этих плоскостей, не совпадает с решеткой ξ^2 и, следовательно, не может совмещаться сама с собой при $\gamma \to \alpha$ деформационном преобразовании.

Вместе с тем полученные результаты оправдывают постановку задачи, связанной с изучением разрешимости уравнений (4.95) – (4.98), (3.92) – (3.95) с учетом ограничений, которым должны подчиняться базисные векторы решеток ξ^2, отождествимых с решетками γ^2 в ориентационно неизменных плоскостях Π_3. Решение ее рассматривается в следующей главе.

Глава 5. УСЛОВИЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ В γ-РЕШЕТКЕ ПЛОСКИХ ДВУХМЕРНЫХ РЕШЕТОК, ИНВАРИАНТНЫХ ОТНОСИТЕЛЬНО ДЕФОРМАЦИОННОГО $\gamma \to \alpha$ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ СОБСТВЕННО ДЕФОРМАЦИИ γ-РЕШЕТКИ ПО БЕЙНУ

Изучение кристаллографии решеток ξ^2 в плоскостях семейства $\{l\,h\,h\}_\gamma$ и кристаллографии прямоугольных решеток ξ^2 свидетельствует о том, что $\gamma \to \alpha$ деформационное преобразование решетки γ при определенных геометрических характеристиках его κ, τ (см. формулы (4.27), (4.15), (4.31), (4.24) и табл. 4.6) допускает существование в ориентационно неизменных плоскостях Π_3 самосовместимых двумерных решеток, образованных узлами решетки γ. Однако периодичность этих решеток ξ^2 отличается от периодичности решеток γ^2, располагающихся в тех же плоскостях Π_3. Типичными кристаллографическими направлениями, в которых это отличие устанавливается непосредственно по целочисленным значениям функций $\tilde{\xi}_{i1}$, $\tilde{\xi}_{i2}$, $\tilde{\xi}_{i3}$ являются направления, задаваемые вектором $\boldsymbol{\zeta}$ (см. формулы (П1.10), (П1.11) и табл. 4.6), а также вектором $\mathbf{e}_3^\gamma$, если ориентационно неизменная плоскость Π_3 параллельна $\mathbf{e}_3^\gamma$ (см. табл. 4.6).

Если решетки ξ^2 и γ^2, принадлежащие одной и той же плоскости Π_3, отличаются периодичностью, то решетка ξ^2 представляет собой подрешетку решетки γ^2. Базисные векторы $\boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi}_1(\mathbf{X}_2)$, $\boldsymbol{\xi}_2 = \mathbf{X}_2$ решетки ξ^2 в этом случае разложимы по векторам решетки γ^2, имеющим меньшую длину, решетка γ^2 не совместима сама с собой при γНН $\to \alpha$ деформационном преобразовании, а плоскость Π_3, содержащая решетку γ^2, как инвариантная плоскость не реализуема.

Такие решетки ξ^2 не представляют интереса и должны исключаться из рассмотрения. Поэтому исследование периодичности решеток γ^2 в направлениях, отличных от направлений базисных векторов решеток ξ^2, и будет задачей настоящей главы.

5.1. Периодичность прямоугольных решеток ξ^2 и решеток γ^2 в ориентационно неизменных плоскостях

Предположим, что заданному вектору $\mathbf{X}_2$ решетки γ, отвечающему требованию (3.97), при некоторых значениях параметра $|k|$ и переменных α, N'' соответствует вектор $\xi_1 = \xi_1(\mathbf{X}_2)$ решетки γ, отвечающий требованию (3.100). Пара векторов

$$\xi_1 = \xi_1(\mathbf{X}_2),\ \xi_2 = \mathbf{X}_2 \tag{5.1}$$

образует базис решетки ξ^2, лежащей в ориентационно неизменной плоскости П₃ с нормалью (4.103). Узлами решетки ξ^2 являются узлы решетки γ^2, лежащей в той же плоскости $П_3$, а их положение задается радиус-векторами

$$\mathbf{X}(\xi^2) = n_1\xi_1 + n_2\xi_2\ ,\quad n_1,\, n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots .$$

Вектору $\mathbf{X}_2$, наряду с векторами (5.1), можно поставить в соответствие еще и вектор

$$\mathbf{X}' = \zeta(\mathbf{X}_2)/\zeta_0\ , \tag{5.2}$$

принадлежащий плоскости векторов (5.1), где вектор $\boldsymbol{\zeta}$, зависящий от $\mathbf{X}_2$, определяется формулой (П1.11), а его координаты (в единицах $a_\gamma/2$) относительно базиса (3.2) – формулами (4.104). Координаты (4.104) принимают целочисленные значения, если целочисленны значения функций (4.96). Однако эти значения взаимно простыми могут и не быть, чем и объясняется наличие натурального делителя ζ_0 в (5.2), который выбирается так, чтобы целочисленные значения частных ζ_1/ζ_0, ζ_2/ζ_0, $\zeta_3/\zeta_0 = 0$ отвечали требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, имеющего минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении.

Переменная n'' (см. (4.99)) в формулах (4.104) и произведение $2^\beta\mu_1\mu_3\tilde{z}\tilde{z}$ не имеют общих множителей, отличных от единицы. Это позволяет представить делитель ζ_0 в виде произведения

$$\zeta_0 = 2^\nu\mu_1\mu_3\tilde{z}\tilde{\tilde{z}}\zeta_0'\ , \tag{5.3}$$

где ζ_0' – нечетное натуральное число, а целочисленный показатель степени ν принимает значения

$$\nu = \begin{cases} [1-(-1)^{|k|/2}]/2, & \text{если } \alpha = 0,\\ 0, & \text{если } \alpha = 1, \end{cases} \tag{5.4а}$$

зависящие от α и $|k|$ при нечетных m_{23}, и фиксированное значение

$$\nu=\beta+\lambda-1 \tag{5.4б}$$

при четных m_{23}. Целочисленные координаты $(\mathbf{e}_1^\gamma,\mathbf{X}')/(a_\gamma/2)$, $(\mathbf{e}_2^\gamma,\mathbf{X}')/(a_\gamma/2)$ вектора (5.2) при таких ν принимают значения, равные либо нечетным целым числам, либо удвоенным целым числам, одно из которых четное, а другое нечетное.

Формула (5.2) при ζ_0 (5.3) принимает вид

$$\mathbf{X}'=\boldsymbol{\zeta}'(\mathbf{X}_2)/\zeta_0', \tag{5.5}$$

где

$$\boldsymbol{\zeta}'(\mathbf{X}_2)=\frac{1}{2^\nu\mu_1\mu_3\widetilde{\tilde{z}z}}\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{X}_2). \tag{5.6}$$

Вектор (5.6) будет вектором решетки γ, если вектором решетки γ является вектор $\boldsymbol{\xi}_1=\boldsymbol{\xi}_1(\mathbf{X}_2)$. Наличие делителя ζ_0' в (5.5) объясняется тем, что вектор (5.6) может и не быть вектором минимальной длины в соответствующем ему кристаллографическом направлении. Основанием для такого утверждения служит хотя бы тот факт, что в формулы (4.104), определяющие координаты (в единицах $a_\gamma/2$) вектора $\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{X}_2)$, в качестве общего множителя входит μ_2. Если $\mu_2\neq 1$, то некоторые из множителей (4.38) в разложении μ_2 на множители (см. формулу (4.40а)) могут оказаться несократимыми при заданном значении переменной n''.

Будем полагать, что вектор (5.5) является вектором решетки γ, имеющим минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, и представим его в виде разложения

$$\mathbf{X}'=n_1'\boldsymbol{\xi}_1+n_2'\boldsymbol{\xi}_2 \tag{5.7}$$

по базисным векторам (5.1) решетки ξ^2, где координаты n_1', n_2' определяются формулами:

$$n_1'=\frac{(\boldsymbol{\xi}_1,\boldsymbol{\zeta})}{\zeta_0\,|\boldsymbol{\xi}_1|},\quad n_2'=\frac{(\boldsymbol{\xi}_2,\boldsymbol{\zeta})}{\zeta_0\,|\boldsymbol{\xi}_2|}. \tag{5.8}$$

Переходя в (5.8) к выражениям (П1.11), (5.3) для $\boldsymbol{\zeta}$, ζ_0 и учитывая формулы (3.55г), (4.44), (4.96в), будем иметь

$$n_1'=\frac{2^\beta\mu_2\eta_k}{2^\nu\tilde{\tilde{z}}\tilde{z}\zeta_0'},\quad n_2'=\frac{2^\alpha N''}{2^\nu\tilde{\tilde{z}}\tilde{z}\zeta_0'}. \tag{5.9}$$

Если координаты (5.8) принимают значения, отличные от целочисленных, то вектор (5.5) вектором решетки ξ^2 не является. В этом случае решетка ξ^2 не совмещается сама с собой при переносе на вектор (5.5) и, следовательно, решетке γ^2 не тождественна.

Именно так обстоит дело с координатой n_1' при $\tilde{z}\bar{z}\neq 1$ (см. первую из формул (5.9)), поскольку μ_2 и $\tilde{z}\bar{z}$ – взаимно простые (см. формулы (4.40а), (4.100), (4.79)), а также при $\beta=0$ (нечетные m_{23}), $\alpha=0$, $|k|/2=on$, $\beta=2,3,4,\ldots$, $\lambda=2$ (четные m_{21}, m_{22}, m_{23}), когда множитель 2^{ν} в знаменателях формул (5.9) отличен от единицы и несократим.

Учитывая это, будем полагать, что целочисленные координаты задаваемого вектора $\mathbf{X}_2$ отвечают требованию

$$\tilde{z}\bar{z}=1 \tag{5.10}$$

и одному из следующих требований: m_{23} – нечетное целое число, а m_{21}, m_{22} – целые числа, одно из которых четное, другое нечетное; m_{23} – четное, а m_{21}, m_{22} – нечетные целые числа. Тогда множитель 2^{ν} в знаменателях формул (5.9) либо равен единице ($\nu=0$ при $\alpha=0$, $|k|/2=en$ и при $\alpha=1$ (см. (5.4а))), либо сократим ($\nu=\beta$ при $\lambda=1$ (см. (5.4б))), и формулы (5.9) принимают вид

$$n_1'=\frac{\eta_k\mu_2}{\zeta_0'}, \quad n_2'=\frac{2^{\alpha-\beta}N''}{\zeta_0'}.$$

Произведение нечетных натуральных $\tilde{z}$ и $\bar{z}$ равно единице, если единице равен каждый из сомножителей, а при $\tilde{z}=1$, $\bar{z}=1$ справедливо равенство $z=1$ (см. формулу (4.100)). С другой стороны, $z=\rho'M$, поэтому требование (5.10) удовлетворяется, если

$$\mu_3'=1,\ \mu=1,\ M=1$$

(см. формулы (4.48а) и (4.43)). Формулы (4.44) при таких μ_3', μ_3, M и $\lambda=1$ (см. требования к координатам m_{21}, m_{22}, m_{23}, указанные выше) принимают вид

$$|m_{23}|=2^{\beta}\mu_1\mu_2,\ M_2=2\mu_1'\mu_2^2,$$

а отношение $f=m_{23}^2/M_2$ выражается формулой

$$f=2^{2\beta-1}\mu_1^2/\mu_1',$$

согласно которой неравенствам (3.36а) удовлетворяет единственное значение $f=1/2$ при $\beta=0$ (нечетные m_{23}) и $\mu_1=1$, $\mu_1'=1$, поскольку $2^{2\beta-1}\geq 2$ при $\beta\geq 1$ (четные m_{23}) и $\mu_1^2/\mu_1'>1$, если $\mu_1>1$, $\mu_1'\geq 1$ (см. формулу (4.37)). Однако значения $\beta=0$, $\lambda=1$ (нечетные m_{23}), $z=1$, $\rho=\mu_1^2/\mu_1'=1$ не удовлетворяют ограничениям (4.87), следующим из условий совместимости вектора $\xi_1(\mathbf{X}_2)$ с вектором решетки γ, имеющим минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, при f из интервала (3.36а).

Таким образом, координаты n'_1, n'_2 в разложении (5.7) целочисленных значений иметь не могут и вектор $\mathbf{X}'$ (5.5) вектором решетки ξ^2 быть не может. Поэтому решетка ξ^2, построенная на векторах (5.1) в плоскости П₃, при любом $\mathbf{X}_2$ будет лишь подрешеткой решетки γ^2, лежащей в плоскости $П_3$.

Следовательно, в γ-решетке не существует плоских прямоугольных решеток, инвариантных относительно деформационного $\gamma \to \alpha$ преобразования решетки γ при собственно деформации γ-решетки по Бейну, т. е. решеток, которые совмещались бы сами с собой при этом преобразовании.

5.2. Периодичность непрямоугольных решеток ξ^2 и решеток γ^2 в ориентационно неизменных плоскостях

Предположим, что функции (3.92) принимают целочисленные значения, отвечающие требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, имеющего минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, при заданном $\mathbf{X}_2$, удовлетворяющем требованию (3.97), и некоторых $|k|$, n_{13}, n_g. Тогда вектору $\mathbf{X}_2$ можно поставить в соответствие пару векторов

$$\xi_1 = \xi_1(\mathbf{X}_2),\ \xi_2 = \mathbf{X}_2\ , \qquad (5.11)$$

образующих базис непрямоугольной решетки ξ^2, состоящей из узлов решетки γ, принадлежащих ориентационно неизменной плоскости $П_3$ с нормалью $\mathbf{N}'_3$ (см. формулу (4.103)), и вектор

$$\mathbf{X}' = \zeta(\mathbf{X}_2)/\zeta_0\ , \qquad (5.12)$$

лежащий в плоскости векторов (5.11).

Зависящий от $\mathbf{X}_2$ вектор ζ в (5.12) определяется формулой (П1.11). Его координаты (в единицах $a_\gamma/2$) относительно базиса (3.2) и модуль как функции $s\eta|$, $|k|$, n_{13} выражаются формулами:

$$\zeta_1 = |m_{23}|(m_{21}n_{13} + s\eta m_{22}|k|\beta c)/(M_2 - m_{23}^2)\ , \qquad (5.13а)$$

$$\zeta_2 = |m_{23}|(m_{22}n_{13} - s\eta m_{21}|k|\beta c)/(M_2 - m_{23}^2)\ , \qquad (5.13б)$$

$$\zeta_3 = 0\ , \qquad (5.13в)$$

$$|\zeta| = (a_\gamma/2)\sqrt{\tilde{\zeta}}\ ,$$

где первые две следуют из (П1.10), если $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ в (П1.10) исключить с помощью формул (3.92); $|k|\beta c$ определяются формулой (3.95);

$$\tilde{\zeta} = \zeta_1^2 + \zeta_2^2 = m_{23}^2[|k|n_{13} + 2(n_{13}^2/M_2)]\ . \qquad (5.14)$$

Согласно (П1.10) функции (5.13), (5.14) принимают целочисленные значения при тех же n_{13}, $|k|$, что и функции (3.92), (3.93). Если значения функций (5.13а), (5.13б) – целые числа, оба нечетные или оба четные, то вектор ζ будет вектором решетки γ. Вектор (5.12) в этом случае будет также вектором решетки γ, имеющим минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении благодаря делителю ζ_0, который можно представить в виде

$$\zeta_0 = 2^{\nu} d, \tag{5.15}$$

где целочисленный показатель степени ν и нечетное натуральное d выбираются так, чтобы значения частных ζ_1/ζ_0, ζ_2/ζ_0 выражались либо взаимно простыми целыми числами, либо удвоенными целыми числами, четным и нечетным, не имеющими общего нечетного множителя.

Предположим, что вектор (5.12) есть вектор решетки γ, имеющий минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, и представим его в виде разложения

$$\mathbf{X}' = n_1'\xi_1 + n_2'\xi_2 \tag{5.16}$$

по векторам (5.11). Координаты n_1', n_2' определяются формулами:

$$n_1' = (\mathbf{X}',[\xi_2,[\xi_1,\xi_2]])/|[\xi_2,\xi_1]|^2, \tag{5.17а}$$

$$n_2' = (\mathbf{X}',[\xi_1,[\xi_2,\xi_1]])/|[\xi_2,\xi_1]|^2 \tag{5.17б}$$

и выражаются через координаты векторов (5.11) относительно базиса (3.2) формулами:

$$n_1' = \frac{\eta_k\,|m_{23}|}{2^{\nu}d}, \quad n_2' = \frac{\eta_k s \eta \tilde{\xi}_{13}}{2^{\nu}d}, \tag{5.18}$$

где $\tilde{\xi}_{13}$ определяется формулой (3.92в).

Решетка ξ^2, тождественная решетке γ^2, должна совмещаться сама с собой при переносе на любой вектор решетки γ^2. Это условие заведомо не выполняется в тех случаях, когда значения координат (5.17) отличны от целочисленных. Тогда период решетки ξ^2 превосходит период решетки γ^2 в направлении $\mathbf{X}'/|\mathbf{X}'|$ и решетка ξ^2 не совмещается сама с собой при переносе на вектор $\mathbf{X}'$ решетки γ^2. Именно так обстоит дело, если произведение $2^{\nu}d$ в знаменателях формул (5.18), равное делителю (5.15), больше единицы и несократимо.

Следовательно, вопрос о существовании непрямоугольных решеток γ^2 в ориентационно неизменных плоскостях Π_3, инвариантных относительно $\gamma \to \alpha$ деформационного преобразования решетки γ, сводится к вопросу о существовании значений натуральных переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$, выделенных требованием целочисленности функций (3.92), (3.93), (3.95), (5.13), (5.14), координат (5.17) и требованием, которое предъявляется к целочисленным координатам вектора решетки γ, имеющего минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении. Решение указанного вопроса предполагает изучение зависимости переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от простых множителей, входящих в разложения $|m_{23}|$, M_2, $M_2 - 2m_{23}^2$, $M_2 - m_{23}^2$ на множители (см. формулы (4.32), (4.44), (4.45), (4.51)). Имея это в виду, перейдем в формулах (3.92), (3.93), (3.95), (5.13), (5.14), (5.18) к разложениям (4.44), (4.45), (4.51), а также к новым переменным и параметрам, полагая

$$n_{13} = 2^{\alpha} n''_{13} n'_{13} , \tag{5.19}$$

$$n_g = 2^{\sigma} n''_g n'_g , \tag{5.20}$$

$$|k| = 2^{r} k'' k' . \tag{5.21}$$

где α, σ, r – неотрицательные целые числа; нечетные натуральные n''_{13} и n'_{13}, n''_g и n'_g, k'' и k' предполагаются взаимно простыми.

В результате будем иметь:

$$\tilde{\xi}_{11} = \frac{\eta_k}{2^{\beta}\mu_1\mu_2\mu_3}(\zeta_1 - m_{21} \mid \tilde{\xi}_{13} \mid) , \tag{5.22а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = -\frac{\eta_k}{2^{\beta}\mu_1\mu_2\mu_3}(\zeta_2 - m_{22} \mid \tilde{\xi}_{13} \mid) , \tag{5.22б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\beta} U'' N' / 2^{\lambda} , \tag{5.22в}$$

$$\tilde{\xi}_1 = 2^{\alpha+r} k'' k' n''_{13} n'_{13} + \frac{2^{2\alpha} n''^2_{13} n'^2_{13} + 2^{2\sigma} n''^2_g n'^2_g}{2^{\lambda} \mu'_1 \mu_2^2 \mu'_3 M} , \tag{5.23}$$

$$|k|\beta c = \sqrt{2^{\alpha} n''_{13} n'_{13} (2^{\alpha} A n''_{13} n'_{13} + 2^{\delta+r} k'' k' B'')} , \tag{5.24}$$

$$\zeta_1 = 2^{\beta} Q \zeta'_1 / 2^{\delta} , \quad \zeta_2 = 2^{\beta} Q \zeta'_2 / 2^{\delta} , \tag{5.25а}$$

$$\zeta_3 = 0 , \tag{5.25б}$$

$$\tilde{\zeta} = 2^{\beta+\alpha} n'_{13} (2^{\beta+r} \mu_1^2 \mu_2^2 \mu_3^2 k'' k' n''_{13} + 2^{\beta+\alpha+1-\lambda} \rho n'_{13} \frac{n''^2_{13}}{\rho'' M}) , \tag{5.26}$$

$$n'_1 = \frac{2^{\beta} \eta_k \mu_1 \mu_2 \mu_3}{2^{\nu} d} , \quad n'_2 = \frac{2^{\beta} \mu_1 \mu_3 N'}{2^{\lambda+\nu} \mu'_1 \mu_2 \mu'_3 M d} . \tag{5.27}$$

Здесь

$$\zeta'_1 = 2^{\alpha} n''_{13} n'_{13} m_{21} + s\eta m_{22} \mid k \mid \beta c ; \tag{5.28а}$$

$$\zeta'_2 = 2^{\alpha} n''_{13} n'_{13} m_{22} - s\eta m_{21} \mid k \mid \beta c ; \tag{5.28б}$$

$$N' = 2^{\alpha} n''_{13} n'_{13} - 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n''_g \; n'_g \; ; \tag{5.29}$$

$$U' = \frac{\eta_k s \eta \mu_1 \mu_3}{\mu'_1 \mu_2 \mu'_3 M} \; ; \tag{5.30}$$

$$A = \frac{D}{\rho' M} \, , \quad B = \mu'_1 \mu_2^2 \mu'_2 \mu_3^2 \Delta \; ; \tag{5.31а}$$

$$Q = \frac{\mu_1}{\mu'_1 \mu_2 \mu'_2 \mu_3 \Delta} \; ; \tag{5.31б}$$

μ_1, μ'_1 определяются формулами (4.37); μ_2 – формулой (4.40а), μ_3, μ'_3 – формулами (4.43), ρ, ρ' – формулами (4.48), μ'_2, Δ – формулами (4.50), значения показателя степени δ определяются формулами (4.52), (4.54).

5.3. Допустимые значения целочисленных показателей степени α, σ, r

Зависимость функций (5.22) – (5.25), (5.28) и координат (5.27) от показателей степени α, σ, r при заданном $\mathbf{X}_2$ рассматривается в прил. 4. Полученные результаты указывают на выделенность приведенных ниже наборов значений α, σ, r.

Во-первых,

$$\begin{gathered} \alpha = 2, \; r = 0, \; \sigma \geq 1 \, , \\ \alpha = 0, \; r = 0, \; \sigma = 0 \, , \\ \alpha = 1, \; r \geq 2, \; \sigma \geq 1 \end{gathered} \tag{5.32а}$$

(см. формулы (П4.4), (П4.5), (П4.7)), если одна из координат m_{21}, m_{22} вектора $\mathbf{X}_2$ – четное число, другая –нечетное, а m_{23} – число нечетное ($\beta = 0$, $\lambda = 1$, $\delta = 0$).

Во-вторых,

$$\begin{gathered} \alpha = 1, \; r = 0, \; \sigma \geq 1 \, , \\ \alpha = 1, \; r \geq 2, \; \sigma = 1 \, , \\ \alpha = 1, \; r \geq 1, \; \sigma \geq 2 \end{gathered} \tag{5.32б}$$

(см. формулы (П4.13), (П4.18)), если m_{21}, m_{22} – нечетные числа, а m_{23} – четное число ($\beta = 1, 2, \ldots, \; \lambda = 1, \; \delta = 1$).

В-третьих,

$$\begin{gathered} \alpha = 2, \; r = 0, \; \sigma = 2 \, , \\ \alpha = 1, \; r \geq 1, \; \sigma = 1 \, , \end{gathered} \tag{5.32в}$$

(см. формулы (П4.24), (П4.28)), если m_{21}, m_{22} – четные числа, а m_{23} – учетверенное целое число ($\beta = 2, 3, \ldots, \; \lambda = 2, \; \delta = 2$).

В-четвертых,

$$\alpha = 2,\ r = 0,\ \sigma = 2 \tag{5.32г}$$

(см. формулы (П4.49)), если m_{21}, m_{22}, m_{23} – удвоенные нечетные числа ($\beta = 1$, $\lambda = 2$, $\delta = 3$).

Показатель степени α принимает конечное множество значений. Так же обстоит дело с показателем степени σ в силу неравенств

$$1 \le 2^{\sigma} n_g'' n_g' \le 2^{\lambda-1} \mu_1' \mu_2^2 \mu_3' M \tag{5.33}$$

(см. (3.83), (5.20), (4.44)). Ограничения же на значения показателя степени r устанавливаются ниже.

5.4. Ограничения на параметры ρ', М задаваемых векторов X_2 в случае непрямоугольных решеток ξ^2

Условия совместимости векторов $\xi_1 = \xi_1(X_2)$, $X' = X'(X_2)$ с векторами решетки γ минимальной длины в соответствующих им кристаллографических направлениях и условие разложимости вектора $X' = X'(X_2)$ по векторам (5.11) подчиняют выбор вектора X_2 ограничениям, которые накладывает (см. прил. 5, формулы (П5.9); прил. 6, формулы (П6.18)) требование разрешимости в натуральных числах корня квадратного из множителя М (см. вторую из формул (4.44)) и множителя μ_3' (см. формулу (4.43б)), или (что то же самое) корня квадратного из частного

$$\rho' = \frac{\mu_2'}{\mu_3^2} = \prod_{n=1}^{t_3} \mu_{3n}^{\alpha_{3n}' - 2\alpha_{3n}},$$

где $\alpha_{3n} = 1, 2, \ldots$, $\alpha_{3n}' \ge 2(\alpha_{3n} + 1)$ при четном α_{3n}', (см. формулу (П6.1)).

Учитывая это, будем полагать далее, что заданному вектору X_2 соответствуют разложения (4.44), в которых множители М, μ_3, μ_3' либо равны единице:

$$M = 1,\ \mu_3 = \mu_3' = 1, \tag{5.34а}$$

либо выражаются формулами:

$$M = \prod_{n=1}^{t_4} M_n^{2\lambda_n},\ \lambda_n = 1, 2, \ldots, \tag{5.34б}$$

$$\mu_3 = \prod_{n=1}^{t_3} \mu_{3n}^{\alpha_{3n}},\ \alpha_{3n} = 1, 2, \ldots, \tag{5.35а}$$

$$\mu_3' = \prod_{n=1}^{t_3} \mu_{3n}^{\alpha_{3n}'} \Big|_{\alpha_{3n}' = 2\tilde{\alpha}_{3n}'},\ \tilde{\alpha}_{3n}' \ge \alpha_{3n} + 1. \tag{5.35б}$$

Здесь $M_1, M_2, \dots, M_{t_4}$ – простые нечетные числа и $\mu_{31}, \mu_{32}, \dots, \mu_{3t_3}$ – простые нечетные числа.

Примерами таких векторов $\mathbf{X}_2$ служат (см. табл. 4.1 и табл. 3.2) векторы:

$$\mathbf{X}_2 = <0\ 1\ \underline{1}>_\gamma /2, \ (M=1, \ \mu_3 = \mu_3' = 1), \tag{5.36а}$$

$$\mathbf{X}_2 = <2\ 4\ \underline{4}>_\gamma /2, \ (M=9, \ \mu_3 = \mu_3' = 1), \tag{5.36б}$$

$$\mathbf{X}_2 = <3\ 4\ \underline{5}>_\gamma /2, \ (M=1, \ \mu_3 = \mu_3' = 1). \tag{5.36в}$$

Что же касается остальных векторов $\mathbf{X}_2$ (из тех, что приводятся в табл. 4.2), то их следует исключить из рассмотрения.

5.5. Зависимость выделенных значений переменных $\mathbf{n}_{13}$, $\mathbf{n}_g$ и параметра |k| от задаваемых параметров $\mathbf{m}_{23}$, $\mathbf{M}_2$

Выводы относительно зависимости целочисленных значений функций (5.22), (5.23), (5.25) и координат (5.27) от множителей $M_1, \mu_{31}, \mu_{11}, \mu_{21}, \Delta_1$ через переменные n_{13}'', n_g'' и параметр k'' (см. формулы (5.19) – (5.21)), полученные в прил. 5 – 9, позволяют выразить n_{13}'', n_g'', k'' в виде произведений

$$n_{13}'' = \mu_2 \sqrt{\mu_3' M}\ \mu_1'' \mu_2'' \mu_3'' \Delta'' , \tag{5.37}$$

$$n_g'' = \mu_2 \sqrt{\mu_3' M}\ \mu_1'' \mu_{1g} \mu_{2g} \mu_3'' \Delta_g , \tag{5.38}$$

$$k'' = k_M'' k_1'' k_2'' k_3'' k_\Delta'' \tag{5.39}$$

множителей

$$\mu_1'' = \begin{cases} \prod_{n=1}^{t_1} \mu_{1n}^{a_{1n}}, & a_{1n} = 0, 1, 2, \dots, \alpha_{1n}', \quad \text{если } \mu_1 \neq 1, \\ 1 , & \text{если } \mu_1 = 1, \end{cases} \tag{5.40а}$$

где $0 \le \alpha_{1n}' \le \alpha_{1n}$, $\alpha_{1n} = 1, 2, \dots$ (см. формулы (4.37)),

$$\mu_{1g} = \begin{cases} \prod_{n=1}^{t_1} \mu_{1n}^{b_{1n}}, & b_{1n} = 0, 1, 2, \dots, \quad \text{если } \mu_1 \neq 1, \\ 1 , & \text{если } \mu_1 = 1, \end{cases} \tag{5.40б}$$

$$\mu_2'' = \begin{cases} \prod_{n=1}^{t_2} \mu_{2n}^{a_{2n}}, & \text{если } \mu_2 \neq 1, \\ 1 , & \text{если } \mu_2 = 1, \end{cases} \tag{5.41а}$$

$$\mu_{2g} = \begin{cases} \prod\limits_{n=1}^{t_2} \mu_{2n}^{b_{2n}}, & \text{если } \mu_2 \neq 1, \\ 1, & \text{если } \mu_2 = 1, \end{cases} \tag{5.41б}$$

где $b_{2n} \geq 0$ при $0 \leq a_{2n} \leq \gamma_{2n} - 1$ и $b_{2n} \geq a_{2n} - \gamma_{2n}$ при $\gamma_{2n} \leq a_{2n} \leq \gamma_{2n} + \alpha_{2n}$, $\gamma_{2n} = 0, 1, 2 \ldots$, $\alpha_{2n} = 1, 2, \ldots$ (см. формулы (4.50а), (4.40а)),

$$\mu_3'' = \begin{cases} \prod\limits_{n=1}^{t_3} \mu_{3n}^{a_{3n}}, \quad a_{3n} = 0, 1, 2, \ldots, \alpha_{3n}, & \text{если } \mu_3' \neq 1, \\ 1, & \text{если } \mu_3' = 1, \end{cases} \tag{5.42}$$

где $\alpha_{3n} = 1, 2, \ldots$ (см. формулу (4.43а)),

$$\Delta'' = \begin{cases} \prod\limits_{n=1}^{t} \Delta_n^{a_n}, \quad a_n = 0, 1, 2, \ldots, \gamma_n, & \text{если } \Delta \neq 1, \\ 1, & \text{если } \Delta = 1, \end{cases} \tag{5.43а}$$

где $\gamma_n = 1, 2, \ldots$ (см. формулу (4.50б)),

$$\Delta_g = \begin{cases} \prod\limits_{n=1}^{t} \Delta_n^{b_n}, \quad b_n = 0, 1, 2, \ldots, & \text{если } \Delta \neq 1, \\ 1, & \text{если } \Delta = 1, \end{cases} \tag{5.43б}$$

$$k_M'' = \prod_{n=1}^{t_4} M_n^{c_n}, \quad k_1'' = \prod_{n=1}^{t_1} \mu_{1n}^{c_{1n}}, \quad k_2'' = \prod_{n=1}^{t_2} \mu_{2n}^{c_{2n}},$$

$$k_3'' = \prod_{n=1}^{t_3} \mu_{3n}^{c_{3n}}, \quad k_\Delta'' = \prod_{n=1}^{t} \Delta_n^{c_n'}, \tag{5.44а}$$

где c_n, c_{1n}, c_{2n}, c_{3n}, $c_n' = 0, 1, 2, \ldots$; если M, μ_1, μ_2, μ_3, $\Delta \neq 1$;

$$k_M'' = 1, \; k_1'' = 1, \; k_2'' = 1, \; k_3'' = 1, \; k_\Delta = 1, \tag{5.44б}$$

если, соответственно, $M = 1$; $\mu_1 = 1$; $\mu_2 = 1$; $\mu_3 = 1$; $\Delta = 1$.

Каждый из этих множителей есть функция неотрицательных целочисленных показателей степени, причем допустимые значения показателей степени в (5.40а), (5.41а), (5.42), (5.43а) ограничены сверху. Поэтому множители μ_1'', μ_2'', μ_3'', Δ'' в (5.37) и их произведение

$$n'' = \mu_1'' \, \mu_2'' \, \mu_3'' \Delta'' \tag{5.45}$$

есть ограниченные сверху функции:

$$1 \leq \mu_1'' \leq \mu_{1\max}'', \quad 1 \leq \mu_2'' \leq \mu_{2\max}'',$$

$$1 \leq \mu_3'' \leq \mu_{3\max}'', \quad 1 \leq \Delta'' \leq \Delta_{2\max}'',$$

$$1 \leq n'' \leq n_{\max}'', \tag{5.46}$$

где

$$\mu''_{1_{max}} = \mu'_1; \quad \mu''_{2_{max}} = \mu_2\mu'_2; \quad \mu''_{3_{max}} = \mu_3; \quad \Delta''_{max} = \Delta; \qquad (5.47)$$
$$n''_{max} = \mu'_1\mu_2\mu'_2\mu_3\Delta;$$

$\mu'_1, \mu_2, \mu'_2, \mu_3, \Delta$ определяются формулами (4.37б), (4.40а), (4.50а), (4.43а), (4.50б).

Множители μ_{1g} (5.40б), μ_{2g} (5.41б), Δ_g (5.43б) в (5.38) есть функции, также ограниченные сверху, поскольку ограничены сверху значения переменной n_g (см. формулу (5.20) и неравенства (5.33)).

Покажем теперь, что при взаимно простых n'_{13} и n''_{13} выделенных, согласно требованиям, которые предъявляются к целочисленным значениям функций (5.22) – (5.25) и координат (5.27), оказывается единственное значение переменной n'_{13}, равное единице.

Пусть

$$n'_{13} = P^a, \quad k' = P^r\tilde{k}',$$

где P – простое число, отличное от 2; a, r – неотрицательные целые числа; нечетное натуральное $\tilde{k}'$ и P – взаимно простые. Тогда функцию (5.24) можно выразить в виде

$$|k|\beta c = \begin{cases} P^a R, & \text{если } 0 \le a \le r, \ r \ge 0, \\ P^{(a+r)/2} R_+, & \text{если } a \ge r+1, \ r \ge 0. \end{cases} \qquad (5.48)$$

Здесь

$$R = \sqrt{2^\alpha n''_{13}(A' + P^{r-a} + B')}\ ; \qquad (5.49а)$$

$$R_+ = \sqrt{2^\alpha n''_{13}(A'P^{r-a} + B')}\ , \qquad (5.49б)$$

где

$$A' = 2^\alpha A n''_{13}, \quad B' = 2^{\delta+r} k''\tilde{k}'B;$$

A и B определяются формулами (5.31а).

При $a \ge r+1$, $r \ge 0$ функция (5.48) может принимать целочисленные значения, если

$$a \ge r+2, \quad r \ge 0\ , \qquad (5.50)$$

где a – четное при четном r и нечетное при нечетном r, поскольку R_+ (5.49б) и P – взаимно простые.

Полагая указанное условие выполненным, будем иметь:

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta}QP^{(a+r)/2}\zeta''_1\ , \quad \zeta_2 = 2^{\beta-\delta}QP^{(a+r)/2}\zeta''_2\ , \qquad (5.51а)$$

$$\zeta_3 = 0\ , \qquad (5.51б)$$

где Q определяется формулой (5.31б),

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha} P^{(a-r)/2} n_{13}'' m_{21} + s\eta m_{22} R_+;$$

$$\zeta_2'' = 2^{\alpha} P^{(a-r)/2} n_{13}'' m_{22} - s\eta m_{21} R_+;$$

$(a-r)/2 \geq 1$ в силу неравенств (5.50), R_+ определяется формулой (5.49б).

Целочисленные значения функций (5.51) имеют общий делитель $d = P^{(a+r)/2} \geq P$, поскольку $(\alpha + r)/2 \geq r + 1 \geq 1$ в силу неравенств (5.50). Координата n_1' (см. первую из формул (5.27)) при таком d и $P \neq 1$ целочисленной быть не может, так как P и $\mu_1\mu_2\mu_3$ – взаимно простые.

При

$$0 \leq a \leq r, \quad r \geq 0$$

функции (5.25) выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} QP^a \zeta_1'', \quad \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} QP^a \zeta_2'', \quad \zeta_3 = 0,$$

где

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha} n_{13}'' m_{21} + s\eta m_{22} R; \quad \zeta_2'' = 2^{\alpha} n_{13}'' m_{22} - s\eta m_{21} R;$$

R определяется формулой (5.49а), а их целочисленные значения имеют общий делитель $d = P^a$.

Значения $P > 1$, $a \geq 1$, $d > 1$ не совместимы с требованием целочисленности координаты n_1', поэтому выделенным следует считать значение $a = 0$, которому соответствуют $d = 1$ и $n_{13}' = 1$.

Таким образом, допустимые значения переменной n_{13} исчерпываются значениями функции

$$n_{13} = 2^{\alpha} \mu_2 \sqrt{\mu_3' M} n'', \tag{5.52}$$

где n'' определяется формулой (5.45), а значения показателя степени α – формулами (5.32).

5.6. Ограничение на допустимые значения функции n'' и задаваемого параметра $|k|$

Наибольшее из допустимых значений n_{13} (5.52) при заданном α выражается формулой

$$n_u = 2^{\alpha} \mu_2 \sqrt{\mu_3' M} n''_{max}, \tag{5.53}$$

где n''_{max} определяется формулой (5.47). Формулы (5.47) и (5.53) удобно представить в виде

$$n''_{max} = 2^{\beta-\delta} \mu_1 |m_{23}| F(f), \tag{5.54}$$

$$n_u = 2^{\alpha+\beta-\lambda/2-\delta} m_{23}^2 F(f) \sqrt{\rho / f},$$

используя формулы (3.74), (4.44), (4.48), (4.51), $f = {m_{23}}^2 / M_2$ и следующие из них равенства

$$\mu_2' \Delta = 2^{2\beta-\delta} \rho F(f), \quad \rho' M = 2^{\delta-\lambda} \mu_2' \Delta / (1-f) = 2^{2\beta-\lambda} \rho / f .$$

Значения натуральной переменной n_{13} ограничены также и снизу (см. неравенства (3.88)), поэтому минимальное значение переменной (5.45) не обязательно равно единице, как это следует из неравенства (5.46).

Неравенства (3.88) в сочетании с неравенством

$$n_{13} \le n_u \tag{5.55}$$

приводят к ограничениям

$$|k|_{min} \le |k| \le |k|_{max} , \tag{5.56}$$

$$n''_{min} \le n'' \le n''_{max} , \tag{5.57}$$

которым должны подчиняться параметр $|k|$ и значения переменной n''.

Максимальное значение – n''_{max} переменной n'' определяется формулой (5.47) либо формулой (5.54). Минимальное значение $|k|_{min}$ параметра $|k|$ зависит от r (см. формулы(5.21), (5.32), (5.39), (5.44)) и определяется формулой

$$|k|_{min} = 2^{r_{min}} , \tag{5.58}$$

где минимальное – r_{min} значение показателя степени r устанавливается с помощью формул (5.32).

Максимальное – $|k|_{max}$ значение $|k|$ и минимальное – n''_{min} значение переменной n'' устанавливаются с помощью:

1) неравенств:

$$\sqrt{\rho} > \frac{2^{1+(\lambda/2)-\beta+\delta-\alpha} |k|_{min} F_1(f)}{F(f)\sqrt{f}} , \tag{5.59а}$$

$$|k|_{min} \le |k| < \frac{1}{SF_1(f)} , \tag{5.59б}$$

$$SF_1(f)|k|n''_{max} < n'' \le n''_{max} , \tag{5.59в}$$

если f принадлежит интервалу (3.35а);

2) неравенств:

$$\sqrt{\rho} \ge \frac{2^{1+(\lambda/2)-\beta+\delta-\alpha} |k|_{min} F_2(f)}{F(f)\sqrt{f}} , \tag{5.60а}$$

$$|k|_{min} \le |k| \le \frac{1}{SF_2(f)} , \tag{5.60б}$$

$$SF_2(f)|k|n''_{max} \le n'' \le n''_{max} , \tag{5.60в}$$

если f принадлежит интервалу (3.36а);

3) неравенств:

$$\sqrt{\rho} > \frac{2^{1+(\lambda/2)-\beta+\delta-\alpha}|k|_{min}F_3(f)}{F(f)\sqrt{f}}, \tag{5.61а}$$

$$|k|_{min} \le |k| < \frac{1}{SF_3(f)}, \tag{5.61б}$$

$$SF_2(f)|k|n''_{max} \le n'' \le SF_3(f)|k|n''_{max}, \tag{5.61в}$$

если f принадлежит интервалу (3.37а);

4) неравенств:

$$\frac{1}{SF_3(f)} \le |k| \le \frac{1}{SF_2(f)}, \tag{5.62а}$$

$$SF_2(f)|k|n''_{max} \le n'' \le n''_{max}, \tag{5.62б}$$

при том же f из интервала (3.37а); где α, ρ определяются, соответственно, формулами (5.32),(4.40), функции $F_1(f)$, $F_2(f)$, $F_3(f)$, $F(f)$ – формулами (3.73), (3.74),

$$S = \frac{2^{1-\alpha+(\lambda/2)-\beta+\delta}}{F(f)\sqrt{\rho f}}.$$

Неравенства (5.59в), (5.60в), (5.61в), (5.62б) определяют область допустимых значений переменной (5.45), в чем нетрудно убедиться, подставляя (5.52) в неравенства (3.88) и разрешая их совместно с неравенством (5.55) относительно n''. Неравенства (5.59б), (5.60б), (5.61б), (5.62а) выражают условия непротиворечивости неравенств (5.59в), (5.60в), (5.61в), (5.62б), а неравенства (5.59а), (5.60а), (5.61а) – условие непротиворечивости неравенств (5.59б), (5.60б), (5.61б).

Неравенства (5.56) накладывают ограничения снизу и сверху на допустимые значения задаваемого параметра $|k|$. Следовательно, значения показателя степени r, множителя k' и функции (5.39), которым соответствуют значения $|k|$ в силу формулы (5.21), должны быть также ограниченными снизу и сверху:

$$r_{min} \le r \le r_{max}, \tag{5.63}$$

$$1 \le k' \le k'_{max}, \tag{5.64}$$

$$1 \le k'' \le k''_{max}, \tag{5.65}$$

где в качестве r_{max}, k'_{max}, k''_{max} следует взять наибольшее из значений показателя степени r, задаваемого множителя k' и функции (5.39), удовлетворяющих, соответственно, неравенствам:

$$r_{max} \le \log_2|k|_{max}, \tag{5.66}$$

$$k'_{max} \le |k|_{max} / 2^{r_{min}} , \tag{5.67}$$

$$k''_{max} \le |k|_{max} / 2^{r_{min}} , \tag{5.68}$$

причем значения k' и k'' должны быть взаимно простыми.

Неравенства (5.66) – (5.68) следуют из неравенств (5.56), выраженных в виде

$$|k|_{min} \le 2^r k' k'' \le |k|_{max} ,$$

если учесть, что максимум каждого из множителей 2^r, k', k'' в произведении $2^r k' k''$, ограниченном сверху, достигается, когда другие два принимают минимальное значение – $2^{r_{min}}$, $k'_{min} = 1$, $k''_{min} = 1$.

Ограничения, накладываемые на функцию (5.39) неравенствами (5.65), ограничивают сверху значения каждого из составляющих ее множителей (5.44а) – функций целочисленных показателей степени, а стало быть и самих показателей степени. Поэтому можно записать:

$$0 \le c_n \le c_{n\,max}, \quad n = 1, 2, \dots , t_4,$$

$$0 \le c_{sn} \le c_{sn\,max}, \quad s - 1, 2, 3, \quad n = 1,2 , \dots , t_5,$$

$$0 \le c'_n \le c'_{n\,max}, \quad n = 1, 2, \dots , t,$$

где $c_{n\,max}$, $c_{sn\,max}$, $c'_{n\,max}$ определяются неявно неравенствами (5.65).

5.7. Ограничения на допустимые значения функции n''_g

Рассмотрим функцию (5.38) и представим ее в виде

$$n''_g = \mu_2 \sqrt{\mu'_3 M G''},$$

принимая обозначение

$$G'' = \mu''_1 \mu_{1g} \mu_{2g} \mu''_3 \Delta_g . \tag{5.69}$$

Тогда переменную (5.20) можно выразить формулой

$$n_g = 2^\sigma \mu_2 \sqrt{\mu'_3 M G''} n'_g . \tag{5.70}$$

Минимальное значение каждого из множителей в (5.69) равно единице (см. формулы (5.40), (5.41б), (5.42), (5.43б)), поэтому

$$G''_{min} = 1,$$

$$n''_{g\,min} = \mu_2 \sqrt{\mu'_3 M} . \tag{5.71}$$

Минимальное значение $n'_{g\,min}$ нечетной натуральной переменной n'_g в (5.20), (5.70) также равно единице. Поэтому наименьшим $n_{g\,min}$ из допустимых значений переменной n_g является значение

$$n_{g\,min} = 2^{\sigma_{min}} n''_{g\,min} , \tag{5.72}$$

не обязательно равное единице, как это следует из неравенств (3.83), (5.33), где минимальное $\sigma_{\min}$ значение показателя степени σ устанавливается с помощью формул (5.32).

Таким образом, выбор значений переменной n_g должен подчиняться ограничениям

$$n_{g\min} \le n_g \le M_2/2 = 2^{\lambda-1}\mu_1'\mu_2^2\mu_3'M\ . \tag{5.73}$$

Подстановка (5.72), (5.70) в (5.73) с учетом (5.71) приводит к неравенствам

$$2^{\sigma_{\min}} \le 2^{\sigma}G''n_g' \le 2^{\lambda-1}\mu_1'\mu_2\sqrt{\mu_3'M}\ , \tag{5.74}$$

ограничивающим сверху допустимые значения показателя степени σ, нечетной натуральной переменной n_g' и значения функций G''. Ограничения эти в явном виде выражаются неравенствами:

$$\sigma_{\min} \le \sigma \le \sigma_{\max}\ , \tag{5.75}$$

$$1 \le n_g' \le n_{g\max}'\ , \tag{5.76}$$

$$1 \le G'' \le G_{\max}''\ , \tag{5.77}$$

где $\sigma_{\max}$, $n_{g\max}'$, $G_{\max}''$ – наибольшие из значений σ, n_g', G'', удовлетворяющих, соответственно, неравенствам:

$$\sigma_{\max} \le \lambda - 1 + \log_2\left(\mu_1'\mu_2\sqrt{\mu_3'M}\right), \tag{5.78}$$

$$n_{g\max}' \le 2^{\lambda-1-\sigma_{\min}}\mu_1'\mu_2\sqrt{\mu_3'M}\ , \tag{5.79}$$

$$G_{\max}'' \le 2^{\lambda-1-\sigma_{\min}}\mu_1'\mu_2\sqrt{\mu_3'M}\ , \tag{5.80}$$

причем $n_{g\max}'$ и произведение $\mu_1\mu_2\mu_3M\Delta$ должны быть взаимно простыми. Неравенства (5.78) – (5.80) следуют из неравенств (5.74), соответственно, при $G''n_g' = 1$, $2^{\sigma}G'' = 2^{\sigma_{\min}}$, $2^{\sigma}n_g' = 2^{\sigma_{\min}}$.

5.8. Ограничения на выбор задаваемых векторов X_2 в случае непрямоугольных решеток ξ^2

Неравенства (5.59a) и (3.35a), (5.60a) и (3.36a), (5.61a) и (3.37a), рассматриваемые совместно, приводят к дополнительным ограничениям на выбор задаваемых векторов $\mathbf{X}_2$, так как не всякий вектор $\mathbf{X}_2$, подходящий с точки зрения требования (3.97) и требований, выражаемых неравенствами (3.35a), (3.36a), (3.37a), имеет параметры λ, β, ρ, $\rho'M$, отвечающие требованиям, которые выражаются равенствами (5.59a), (5.60a), (5.61a). Установим эти ограничения в явном виде.

Пусть вектору $\mathbf{X}_2$ соответствуют значение отношения $f = m_{23}^2/M_2$, принадлежащее интервалу (3.35а), и такое значение произведения

$$z = \rho' M \ , \tag{5.81}$$

что $\sqrt{z}$ – нечетное натуральное число (см. п. 5.4 и формулы (5.34)).

Исключая f в (3.35а) с помощью формулы

$$f = \rho / z' \ , \tag{5.82}$$

где

$$z' = 2^{\lambda - 2\beta} z \ , \tag{5.83}$$

перейдем от неравенств (3.35а) к неравенствам

$$z'/3 < \rho < \left(2 - 2^{2/3}\right) z' \ , \tag{5.84а}$$

а неравенство (5.59а) выразим в виде

$$\rho > q' \sqrt{z'} F_1(f) / F(f) \ , \tag{5.84б}$$

где

$$q' = 2^{1+(\lambda/2)-\beta+\delta-\alpha} \left|k\right|_{min} ; \tag{5.85}$$

$\left|k\right|_{min}$ определяется формулой (5.58).

Разрешим неравенство (5.84б) относительно ρ. Для этого преобразуем его к виду

$$\sqrt{4\rho z' - 3\rho^2} - \left(2z' + q'\sqrt{z'} - 3\rho\right) > 0, \tag{5.86}$$

используя равенства

$$\rho F(f)/F_1(f) = z' f F(f)/F_1(f) = z'\left[\sqrt{4f - 3f^2} - (2 - 3f)\right] = \sqrt{4z'\rho - 3\rho^2} - (2z' - 3\rho).$$

Вычитаемое в (5.86) принимает только положительные значения. Действительно,

$$2z' + q'\sqrt{z'} - 3\rho \equiv 2z' + q'\sqrt{z'} - 3\left(2 - 2^{2/3}\right)z' + 3\left(2 - 2^{2/3}\right)z' - 3\rho \equiv$$

$$\equiv 2^{2/3}\left(3 - 2^{4/3}\right)z' + q'\sqrt{z'} + 3\left[\left(2 - 2^{2/3}\right)z' - \rho\right],$$

а $2^{2/3}\left(3 - 2^{4/3}\right)z' + q'\sqrt{z'} + 3\left[\left(2 - 2^{2/3}\right)z' - \rho\right] > 0$, так как $3 - 2^{4/3} > 0$ и $\left(2 - 2^{2/3}\right)z' - \rho > 0$ в силу неравенств (5.84а).

Это обстоятельство позволяет перейти от неравенства (5.86) к алгебраическому неравенству

$$4\rho z' - 3\rho^2 - \left(2z' + q'\sqrt{z'} - 3\rho\right)^2 > 0, \tag{5.87}$$

ему эквивалентному.

Неравенство (5.87), а стало быть, и неравенство (5.84б) верны, если

$$\sqrt{z'} > q'\sqrt{3}/4 \ , \tag{5.88а}$$

$$\rho'_- < \rho < \rho'_+ \ , \tag{5.88б}$$

где

$$\rho'_\pm = \sqrt{z'}\left(8\sqrt{z'} + 3q' \pm \sqrt{16z' - 3q'^2}\right)/12 \ . \tag{5.89}$$

Найдем решение системы неравенств (5.84а), (5.88б) относительно ρ, полагая условие (5.88а) выполненным. Заметим, что в связи с этим

$$\rho'_\pm > z'/3, \ \rho'_+ > \left(2 - 2^{2/3}\right)z' \ ,$$

поскольку

$$\rho'_+ - (z'/3) = \sqrt{z'}\left(4\sqrt{z'} + 3q' + \sqrt{16z' - 3q'^2}\right)\Big/12 > 0 \ ,$$

$$\rho'_- - (z'/3) \equiv \frac{\left[\rho'_- - (z'/3)\right]\left[\rho'_+ - (z'/3)\right]}{\left[\rho'_+ - (z'/3)\right]} = \frac{q'z'\left(q' + 2\sqrt{z'}\right)}{12\left[\rho'_+ - (z'/3)\right]} > 0 \ ,$$

$$\rho'_+ - \left(2 - 2^{2/3}\right)z' = \sqrt{z'}\left[2^{8/3}\left(3 - 2^{4/3}\right)\sqrt{z'} + 3q' + \sqrt{16z' - 3q'^2}\right]\Big/12 > 0 \ .$$

Следовательно, система неравенств (5.84а), (5.88б) имеет решение

$$\rho'_- < \rho < \left(2 - 2^{2/3}\right)z' \tag{5.90}$$

при условии

$$\rho'_- < \left(2 - 2^{2/3}\right)z' . \tag{5.91}$$

Условие (5.91), выраженное в виде

$$\sqrt{z'}\left[2^{8/3}\left(3 - 2^{4/3}\right)\sqrt{z'} + 3q' - \sqrt{16z' - 3q'^2}\right]\Big/12 < 0$$

с помощью подстановки (5.89) в (5.90), приводит к неравенству относительно z'. Неравенство это эквивалентно алгебраическому неравенству

$$z' - \frac{3q'A_0}{2\left(1 - A_0^2\right)}\sqrt{z'} - \frac{3q'^2}{4\left(1 - A_0^2\right)} > 0$$

и верно, если

$$\sqrt{z'} > \sqrt{z'_+} \ . \tag{5.92}$$

Здесь

$$A_0 = 2^{2/3}\left(3 - 2^{4/3}\right) \ ;$$

$$\sqrt{z'_+} = \frac{q'}{2A_+} \ , \tag{5.93а}$$

где

$$A_+ = \sqrt{3}\left(\sqrt{4 - A_0^2} - A_0\sqrt{3}\right)/6 = \left(2^{1/3} - 1\right)\left(2^{2/3} - 1\right) . \tag{5.93б}$$

Неравенства (5.88а), (5.92), взятые вместе, образуют систему неравенств, которая имеет решение

$$\sqrt{z'} > \sqrt{z'_+}\,, \tag{5.94}$$

поскольку $\sqrt{z'_+} > q'\sqrt{3}/4$.

Решение (5.90) системы неравенств (5.84) и условие (5.94) ее разрешимости удобно представить в виде

$$2^{\lambda-2\beta} z f_-^{(1)} < \rho < 2^{\lambda-2\beta}\left(2-2^{2/3}\right)z\,, \tag{5.95а}$$

$$\sqrt{z} > \sqrt{z_+}\,, \tag{5.95б}$$

выделив явно зависимость от λ, β, где

$$f_-^{(1)} = \frac{1}{3}\left[2+\frac{3q}{4\sqrt{z}}-\sqrt{1-\frac{3q^2}{16z}}\right]; \tag{5.96}$$

$$\sqrt{z_+} = \frac{q}{2A_+}\,; \tag{5.97}$$

$$q = 2^{1+\delta-\alpha}|k|_{\min}\,, \tag{5.98}$$

а $\sqrt{z_+}$ принимает значения

$$\sqrt{z_+} \approx \begin{cases} 1{,}6374, & \text{если } q = 1/2, \\ 6{,}5497, & \text{если } q = 2, \\ 13{,}0995, & \text{если } q = 4, \\ 26{,}1990, & \text{если } q = 8. \end{cases} \tag{5.99}$$

Итак, значения нечетных взаимно простых z и ρ, соответствующих (см. формулы (4.48), (4.44), (4.37), (4.43), (5.81)) каждому из задаваемых векторов $\mathbf{X}_2$, связываемых с интервалом (3.35а) значений f, должны удовлетворять ограничениям (5.95). В противном случае вектору $\mathbf{X}_2$ нельзя поставить в соответствие непрямоугольную решетку ξ^2, отождествимую с решеткой γ^2, принадлежащей той же плоскости Π_3, что и решетка ξ^2.

Некоторое представление о значениях z и ρ можно составить обратившись к табл. 5.1, в которой приводятся наименьшее из значений β, z и ρ, совместимых с ограничениями (5.95).

Пусть вектору $\mathbf{X}_2$ соответствует значение f, принадлежащее интервалу (3.36а). Исключая f в (3.36а) с помощью (3.82), перейдем от неравенств (5.36а) к неравенствам

$$\left(2-2^{2/3}\right)z' < \rho \le z'/2\,, \tag{5.100а}$$

а неравенство (5.60а) выразим в виде

$$\rho \ge q'\sqrt{z'}F_2(f)/F(f)\,, \tag{5.100б}$$

где z', q' определяется формулами (5.83), (5.85);

$$\frac{F_2(f)}{F(f)} = \frac{2-f}{2(1-f)} = \frac{2z'-\rho}{2(z'-\rho)} .$$

Неравенство (5.100б) верно при ρ из интервала

$$\rho'_- \le \rho \le \rho'_+ , \tag{5.101}$$

где

$$\rho'_\pm = \sqrt{z'}\left(q' + 2\sqrt{z'} \pm \sqrt{4z' - 12q'\sqrt{z'} + q'^2}\right)/4 , \tag{5.102}$$

если выполняется одно из условий:

$$0 < \sqrt{z'} \le q'\left(3 - 2\sqrt{2}\right)/2 , \tag{5.103а}$$

$$\sqrt{z'} \ge q'\left(3 + 2\sqrt{2}\right)/2 . \tag{5.103б}$$

Таблица 5.1

Наименьшие из значений β, z, ρ при f из интервала (3.35а)

<table>
<tr><th>λ</th><th>β</th><th>z</th><th>ρ</th><th>α</th><th>δ</th><th>q</th></tr>
<tr><td rowspan="3">1</td><td rowspan="3">0</td><td>9</td><td>7</td><td>2</td><td rowspan="3">0</td><td>0,5</td></tr>
<tr><td>81</td><td>65</td><td>0</td><td>2</td></tr>
<tr><td>289</td><td>229
231
233
235
237</td><td>1</td><td>4</td></tr>
<tr><td rowspan="4">1</td><td>3</td><td>81</td><td>1</td><td rowspan="4">1</td><td rowspan="4">1</td><td>2</td></tr>
<tr><td>1</td><td>289</td><td>57
59</td><td>4</td></tr>
<tr><td>1</td><td rowspan="2">841</td><td>171
173</td><td rowspan="2">8</td></tr>
<tr><td>2</td><td>43</td></tr>
<tr><td rowspan="2">2</td><td>2</td><td>49</td><td>5
9</td><td>2</td><td rowspan="2">2</td><td>2</td></tr>
<tr><td>2</td><td>961</td><td>97
99</td><td>1</td><td>8</td></tr>
<tr><td>2</td><td>1</td><td>225</td><td>91</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr>
</table>

Замечая далее, что $\frac{\sqrt{z'}}{4}\left(q'+2\sqrt{z'}\right)-\frac{z'}{2}=\frac{q'\sqrt{z'}}{4}$, легко видеть, что $\rho'_+ > z'/2$, поэтому система неравенств (5.100а), (5.101) совместна, если

$$\rho'_- - (z'/2) = \sqrt{z'}\left(q' - \sqrt{4z' - 12q'\sqrt{z'} + q'^2}\right)\Big/4 \le 0 \ . \qquad (5.104)$$

Неравенство (5.104) эквивалентно алгебраическому неравенству

$$\sqrt{z'}\left(3q' - \sqrt{z'}\right) \le 0$$

и верно, если

$$\sqrt{z'} \ge 3q' \ . \qquad (5.105)$$

Условия, выражаемые неравенствами (5.103а) и (5.105), не совместимы, а условие (5.103б) выполняется заведомо, если выполняется условие (5.105). Вместе с тем знак разности

$$\rho'_- - \left(2 - 2^{2/3}\right)z' = \sqrt{z'}\left(q' + 2\left(2^{5/3} - 3\right)\sqrt{z'} - \sqrt{4z' - 12q'\sqrt{z'} + q'^2}\right)\Big/4 \ ,$$

а стало быть, и решение системы неравенств (5.100) также зависят от z'. Смена знака происходит при $\sqrt{z'} = \sqrt{z'_+}$, где $\sqrt{z'_+}$ определяется формулой (5.93а), причем $\rho'_- - \left(2 - 2^{2/3}\right)z' \le 0$, если $\sqrt{z'} \ge \sqrt{z'_+}$, и $\rho'_- - \left(2 - 2^{2/3}\right)z' > 0$, если $3q' \le \sqrt{z'} < \sqrt{z'_+}$.

Следовательно, система неравенств (5.100) имеет решение $\rho'_- \le \rho \le z'/2$, если $3q' \le \sqrt{z'} < \sqrt{z'_+}$, и $\left(2 - 2^{2/3}\right)z' < \rho \le z'/2$, если $\sqrt{z'} \ge \sqrt{z'_+}$, где ρ'_- определяется формулами (5.102).

Решения эти и условия их существования удобно представить в виде

$$2^{\lambda-2\beta}\left(2 - 2^{2/3}\right)z < \rho \le 2^{\lambda-2\beta}z/2 \ , \qquad (5.106а)$$

если

$$\sqrt{z} \ge \sqrt{z_+} \ , \qquad (5.106б)$$

и

$$2^{\lambda-2\beta}zf_-^{(2)} \le \rho \le 2^{\lambda-2\beta}z/2 \ , \qquad (5.107а)$$

если

$$3q \le \sqrt{z} < \sqrt{z_+} \ , \qquad (5.107б)$$

где

$$f_-^{(2)} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{2\sqrt{z}} - \sqrt{1 - \frac{3q}{\sqrt{z}} + \frac{q^2}{4z}}\right) . \qquad (5.108)$$

Здесь q определяется формулой (5.98), $\sqrt{z_+}$ – формулой (5.97), а значения $\sqrt{z_+}$ – формулами (5.99).

Таким образом, каждый из векторов $\mathbf{X}_2$, связываемых с интервалом (3.36а) значений f, должен отвечать либо ограничениям (5.106), либо ограничениям (5.107). Последние допускают лишь конечное множество значений показателя степени β, поскольку конечное множество значений принимают q, решения неравенств (5.107б) и $f_-^{(2)}$. Перечень значений λ, β, z, ρ, соответствующих векторам $\mathbf{X}_2$, выделенным с точки зрения ограничений (5.107), приводится в табл. 5.2.

Что же касается ограничений (5.106), то в этом случае можно указать (табл. 5.3) только наименьшие из значений z, ρ, совместимых с (5.106), поскольку неравенство (5.106б) допускает сколь угодно большие значения z. Судя по данным этих таблиц, векторы $\mathbf{X}_2$ (5.36), которым соответствуют f из интервала (3.36а), значения ρ, ρ′, равные единице, и значения $z = \rho' M$, равные единице, девяти и единице, ограничениям (5.106), (5.107) удовлетворять не могут и должны быть исключены из рассмотрения. Вывод этот в отношении вектора $\mathbf{X}_2$ (5.36а) подтверждается результатами исследования (см. п. 4.5) кристаллографии непрямоугольных решеток ξ^2 в плоскостях семейства $\{lhh\}_\gamma$.

Пусть вектору $\mathbf{X}_2$ соответствует значение f, принадлежащее интервалу (3.37а). Рассмотрим неравенства (3.37а), (5.61а) и выразим их в виде

$$z'/2 < \rho < \left(2-\sqrt{2}\right)z' , \tag{5.109а}$$

$$\rho > \sqrt{z'}\left(q' + 2\sqrt{z'}\right)/4 , \tag{5.109б}$$

используя формулы (5.82), (5.83), (5.85),

$$\frac{F_3(f)}{F(f)\sqrt{f}} = \frac{\sqrt{f}}{2(2f-1)} = \frac{\sqrt{\rho z'}}{2(2\rho - z')} .$$

Система неравенств (5.109) совместна при условии

$$\sqrt{z'}\left(q' + 2\sqrt{z'}\right)/4 < \left(2-\sqrt{2}\right)z' , \tag{5.110}$$

поскольку $\left[\sqrt{z'}\left(q' + 2\sqrt{z'}\right)/4\right] - (z'/2) = q'\sqrt{z'}/4 > 0$.

Неравенство (5.110) эквивалентно неравенству

$$\left(3-2\sqrt{2}\right)\sqrt{z'}\left[\left(3+2\sqrt{2}\right)q' - 2\sqrt{z'}\right]/4 < 0$$

и верно, если

$$\sqrt{z'} > \left(3+2\sqrt{2}\right)q'/2 .$$

Таблица 5.2

Значения параметров λ, β, z, ρ вектора $\mathbf{X}_2$, отвечающего ограничениям (5.107) при f из интервала (3.36а)

<table>
<tr><th>λ</th><th>β</th><th>z</th><th>ρ</th><th>α</th><th>δ</th><th>q</th></tr>
<tr><td>1</td><td>0</td><td>169</td><td>143
145
147
149
151
153
155
157
159
161
163
165
167</td><td>1</td><td>0</td><td>4</td></tr>
<tr><td rowspan="5">1</td><td rowspan="2">1</td><td>169</td><td>37
41</td><td rowspan="5">1</td><td rowspan="5">1</td><td>4</td></tr>
<tr><td>625</td><td>143
147
149
151
153</td><td>8</td></tr>
<tr><td rowspan="2">2</td><td>169</td><td>9</td><td>4</td></tr>
<tr><td>625</td><td>37
39</td><td>8</td></tr>
<tr><td>3</td><td>625</td><td>9</td><td>8</td></tr>
<tr><td rowspan="2">2</td><td>2</td><td>625</td><td>71
73
77</td><td rowspan="2">1</td><td rowspan="2">2</td><td rowspan="2">8</td></tr>
<tr><td>3</td><td>625</td><td>19</td></tr>
<tr><td>2</td><td>1</td><td>169</td><td>71
73
75
77
79
81
83</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr>
</table>

Таблица 5.3

Наименьшие из значений β, z, ρ при f из интервала (3.36а)

λ	β	z	ρ	α	δ	q
1	0	25	21 23	2	0	0,5
		49	41 43 45 47	0	0	2
		225	187 191 193 197 199 203 209 211 217 221 223	1	0	4
1	1	49	11	1	1	2
	2		3			
	1	225	47 49 53	1	1	4
	2		13			
1	1	729	151 155 157 161 163 167 169 173 175 179 181	1	1	8

Окончание табл. 5.3

λ	β	z	ρ	α	δ	q
1	2	729	41 43	1	1	8
	3	729	11			
2	2	121	13 15	2	2	2
	2	729	77 79 83 85 89 91	1	2	8
	3	729	19	1	2	8
	4	729	5	1	2	8
	1	225	97 101 103 107 109	2	3	4

Таким образом, система неравенств (5.109) имеет решение

$$2^{\lambda-2\beta} z f_{-}^{(3)} < \rho < 2^{\lambda-2\beta}\left(2-\sqrt{2}\right)z \qquad (5.111а)$$

при условии, что

$$\sqrt{z} > \sqrt{z_0}\ . \qquad (5.111б)$$

В формулах (5.111)

$$f_{-}^{(3)} = \frac{1}{2}\left(1+\frac{q}{2\sqrt{z}}\right); \qquad (5.112)$$

q определяется формулой (5.98),

$$\sqrt{z_0} = \left(3+2\sqrt{2}\right)q/2 \approx \begin{cases} 1{,}4571, & \text{если } q=1/2, \\ 5{,}8284, & \text{если } q=2, \\ 11{,}6569, & \text{если } q=4, \\ 23{,}3137, & \text{если } q=8. \end{cases} \qquad (5.113)$$

Следовательно, каждый из векторов $\mathbf{X}_2$, связываемых с интервалом (3.37а) значений f, должен иметь параметры λ, β, z, ρ, значения которых отвечают ограничениям (5.111). Наименьшие из таких значений β, z, ρ приводятся в табл. 5.4.

Отметим, наконец, что ограничения снизу на параметр ρ вектора $\mathbf{X}_2$, накладываемые неравенствами (5.59а), (5.60а), (5.61а) при заданных значениях параметров $\lambda = 1, 2$, $\beta = 1, 2, \ldots$, $z = 3^2, 5^2, \ldots$ и переменной $\alpha = 0, 1, 2$ сужают интервалы принадлежности $f = m_{23}^2/M_2$. В этом нетрудно убедиться, выражая решения (5.95а), (5.107а), (5.111а) систем неравенств (5.84), (5.100), (5.109) с помощью формул (5.82), (5.83) непосредственно через f в виде:

$$f_-^{(1)} < f < 2 - 2^{2/3} \text{ , если } \sqrt{z} = \sqrt{z_+} \ ;$$

$$f_-^{(2)} \le f \le 1/2 \text{ , если } 3q \le \sqrt{z} < \sqrt{z_+} \ ;$$

$$f_-^{(3)} < f < 2 - \sqrt{2} \text{ , если } \sqrt{z} > \sqrt{z_0} \ ,$$

где $f_-^{(1)}, f_-^{(2)}, f_-^{(3)}$ определяются формулами (5.96), (5.108), (5.112), $\sqrt{z_+}$, $\sqrt{z_0}$ – формулами (5.97), (5.113).

Таблица 5.4

Наименьшие из значений β, z, ρ при f из интервала (3.37а)

<table>
<tr><th>λ</th><th>β</th><th>z</th><th>ρ</th><th>α</th><th>δ</th><th>q</th></tr>
<tr><td rowspan="4">1</td><td rowspan="4">0</td><td rowspan="2">25</td><td>27</td><td rowspan="2">2</td><td rowspan="4">0</td><td rowspan="2">0,5</td></tr>
<tr><td>29</td></tr>
<tr><td>49</td><td>57</td><td>0</td><td>2</td></tr>
<tr><td>169</td><td>197</td><td>1</td><td>4</td></tr>
<tr><td rowspan="3">1</td><td rowspan="3">1</td><td>81</td><td>23</td><td rowspan="3">1</td><td rowspan="3">1</td><td>2</td></tr>
<tr><td>169</td><td>49</td><td>4</td></tr>
<tr><td>625</td><td>183</td><td>8</td></tr>
<tr><td rowspan="2">2</td><td rowspan="2">2</td><td>121</td><td>17</td><td>2</td><td rowspan="2">2</td><td>2</td></tr>
<tr><td>625</td><td>91</td><td>1</td><td>8</td></tr>
<tr><td>2</td><td>1</td><td>225</td><td>131</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr>
</table>

Что же касается самих векторов $\mathbf{X}_2$, из числа допустимых, то их длины достаточно велики, если судить по данным табл. 5.1 – 5.4, т. е. инвариантные относительно γ → α преобразования направления в γ-решетке связаны с узлами координационных сфер, имеющих достаточно большие номера Z_{KC}.

Заключительные замечания

Возможность описания структурной перестройки кристаллической решетки при $\gamma \to \alpha$ мартенситном превращении фаз как деформационного преобразования с инвариантной плоскостью при собственно деформации γ-решетки по Бейну в качестве необходимого условия предполагает разрешимость в натуральных или целых числах при некотором $\mathbf{X}_2$ и некоторых значениях переменных n_{13} (5.52), n_g (5.70) и параметра $|k|$ (5.91) следующих уравнений:

1) уравнения

$$|k|\beta c = \mu_2\mu_3 n'' R \tag{5.114а}$$

относительно функции (3.94), где

$$R = \sqrt{2^{\alpha}\left[2^{\alpha}D + 2^{\delta+r}k''k'\sqrt{z}\left(n_{max}''/n''\right)\right]}\ ; \tag{5.114б}$$

2) уравнений

$$\zeta_1 = \frac{|m_{23}|n''\zeta_1''}{2^{\delta}n_{max}''},\ \ \zeta_2 = \frac{|m_{23}|n''\zeta_2''}{2^{\delta}n_{max}''},\ \ \zeta_3 = 0 \tag{5.115а}$$

относительно координат (5.13) вектора $\zeta(\mathbf{X}_2)$ в (5.12), где

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha}m_{21}\sqrt{z} + s\eta m_{22}R\ ,\quad \zeta_2'' = 2^{\alpha}m_{22}\sqrt{z} - s\eta m_{21}R\ ; \tag{5.115б}$$

3) уравнений

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k\left(\zeta_1 - m_{21}|\tilde{\xi}_{13}|\right)/|m_{23}|,\quad \tilde{\xi}_{12} = \eta_k\left(\zeta_2 - m_{22}|\tilde{\xi}_{13}|\right)/|m_{23}|\ , \tag{5.116а}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = \frac{2^{\beta-\lambda}\eta_k s\eta\mu_1 N''}{\mu_1'\sqrt{z}} \tag{5.116б}$$

относительно координат (3.92) вектора $\xi_1(\mathbf{X}_2)$, где

$$N'' = 2^{\alpha}n'' - 2^{\sigma}\eta_k\eta_g n_g' G''\ , \tag{5.117}$$

4) уравнения

$$\tilde{\xi}_1 = 2^{\alpha+r}\mu_2\mu_3 k''k'n''\sqrt{z} + \frac{2^{2\alpha}n''^2 + 2^{2\sigma}n_g'^2 G''^2}{2^{\lambda}\mu_1'} \tag{5.118}$$

относительно суммы (3.93) их квадратов.

Целочисленные координаты m_{21}, m_{22}, m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ при заданном $|\mathbf{X}_2| = a_{\gamma}\sqrt{M_2}/2$, где M_2 определяется формулой (3.13), выбираются из множества решений m_1, m_2, m_3 систем уравнений (3.8) при $M = M_2$ (где M_2 – четное натуральное число), отвечающих требованиям (3.96), (3.97), которые следуют из условий совместимости вектора ξ_2 (3.12б) с вектором решетки γ, имеющим минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении.

Примерами таких векторов служат векторы $\mathbf{X}_2$, приведенные в табл. 5.2, которым соответствуют M_2 из интервала [2, 74], а также векторы:

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 2\ 6\ \underline{6} >_\gamma /2 \qquad \left(|m_{23}| = 2\cdot 3,\ M_2 = 2^2\cdot 3^0\cdot 19\right), \tag{5.119а}$$

$$\begin{matrix} \mathbf{X}_2 = a_\gamma < 1\ 7\ \underline{6} >_\gamma /2 \\ \mathbf{X}_2 = a_\gamma < 5\ 5\ \underline{6} >_\gamma /2 \end{matrix} \qquad \left(|m_{23}| = 2\cdot 3,\ M_2 = 2\cdot 3^0\cdot 43\right), \tag{5.119б}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 1\ 6\ \underline{7} >_\gamma /2 \qquad \left(|m_{23}| = 7,\ M_2 = 2\cdot 7^0\cdot 43\right), \tag{5.119в}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 4\ 5\ \underline{7} >_\gamma /2 \qquad \left(|m_{23}| = 7,\ M_2 = 2\cdot 7^0\cdot 45\right), \tag{5.119г}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 3\ 7\ \underline{6} >_\gamma /2 \qquad \left(|m_{23}| = 2\cdot 3,\ M_2 = 2\cdot 3^0\cdot 47\right), \tag{5.119д}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 3\ 6\ \underline{7} >_\gamma /2 \qquad \left(|m_{23}| = 7,\ M_2 = 2\cdot 7^0\cdot 47\right), \tag{5.119е}$$

$$\mathbf{X}_2 = a_\gamma < 0\ 8\ \underline{6} >_\gamma /2 \qquad \left(|m_{23}| = 2\cdot 3,\ M_2 = 2^2\cdot 3^0\cdot 5^2\right), \tag{5.119ж}$$

которым соответствуют M_2 из интервала [76, 100].

Ни те, ни другие, однако, не отвечают требованиям, следующим из условия совместимости векторов $\xi_1 = \xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\mathbf{X}' = \mathbf{X}'(\mathbf{X}_2)$ с векторами решетки γ минимальной длины в соответствующих им кристаллографических направлениях и условия разложимости (5.16) вектора $\mathbf{X}' = \mathbf{X}'(\mathbf{X}_2)$ по базисным векторам $\xi_1 = \xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\xi_2 = \mathbf{X}_2$ решетки ξ^2. Требования эти накладывают ограничения на некоторые из числовых параметров μ_1, μ_1', μ_2, μ_3, μ_3', β, λ, M, D, ρ', ρ, δ, μ_2', Δ (см. формулы (4.37), (4.40а), (4.43), (4.46), (4.48), (4.50)), зависящих от $|m_{23}|$, M_2, $M_2 - 2m_{23}^2$, $M_2 - m_{23}^2$ (см. формулы (4.44), (4.45), (4.51)). К ним относятся параметры β, λ, δ – показатели степени при множителе 2 в выражениях (4.44), (4.51), параметры M, μ_3' и параметры ρ, z.

Допустимые значения параметров β, λ, δ указываются в пояснениях к формулам (5.32). Таковыми не являются, в частности, значения $\beta = 1$, $\lambda = 2$, $\delta = 6$ $(M_2 - m_{23}^2 = 2^6)$, соответствующие вектору (5.119ж).

Допустимые значения показателей степени при простых множителях в произведениях M, μ_3', отличных от единицы, должны выражаться (см. формулы (5.34б), (5.35)) четными натуральными числами, т. е. требуется разрешимость в натуральных числах корней квадратных из M и μ_3'. Ни один из оставшихся – (5.119а) – (5.119е) векторов (5.119) не отвечает этому требованию, так как им соответствуют $M = 19, 43, 45, 47$.

Допустимые значения параметров ρ (4.48б) и z (5.61), где $\rho = 1, 3, 7, \ldots$, $z = 3^2, 5^2, 7^2, \ldots$ (см. табл. 5.1 – 5.4), должны удовлетворять ограничениям (5.95), (5.106) и (5.107), (5.111) в зависимости от интервала принадлежности значения $f = m_{23}^2/M_2$, соответствующего заданному $\mathbf{X}_2$. Кроме того, данные табл. 5.1 – 5.4 указывают на то, что значения $\rho' = 1$ и $M = 1$ взаимно исключают друг друга, поскольку минимальное значение их произведения z отлично от единицы.

Итак, векторы $\mathbf{X}_2$, соответствующие значениям M_2 из интервала [2, 100], не удовлетворяют необходимым требованиям. Поиски подходящих векторов $\mathbf{X}_2$ путем последовательного перебора векторов решетки γ, соответствующих большим значениям M_2, хотя и не лишены смысла (пока не доказана неразрешимость уравнений (5.114) – (5.118) в определяемом этими требованиями классе инвариантных относительно $\gamma \to \alpha$ преобразования кристаллографических направлений (3.14)), но трудоемки. Более перспективным представляется целенаправленное их конструирование с использованием в каждом конкретном случае экспериментальных данных относительно параметров кристаллических решеток γ и α фаз. Разрешимость же уравнений (5.114) – (5.118) при заданном $\mathbf{X}_2$ допускает проверку путем прямых вычислений, поскольку переменные n_{13}, n_g и параметр $|k|$ выражаются (см. формулы (5.52), (5.70), (5.21)) через целочисленные и натуральные переменные $\alpha, n'', \sigma, G'', n_g', r, k'', k'$, принимающие конечное число выделенных значений.

Значения целочисленных показателей степени α, σ, r при множителе 2 в (5.52), (5.70), (5.21) определяются формулами (5.32) в зависимости от задаваемого вектора $\mathbf{X}_2$ и либо фиксированы, либо ограничены снизу и сверху (см. формулы (5.32) и неравенства (5.75), (5.78), (5.63), (5.66)).

Значения переменных n'', G'', k'' есть значения ограниченных сверху и снизу, в силу неравенств (5.57), (5.59в), (5.60в), (5.61в), (5.61б), (5.77), (5.80), (5.65), (5.68), функций (5.45), (5.69), (5.39) выделенных целочисленных аргументов (см. формулы (5.40) – (5.44)).

Что же касается переменных n'_g, k', то их допустимые значения – нечетные натуральные числа, взаимно простые с n'', G'', k'' и также ограниченные сверху и снизу (см. неравенства (5.76), (5.79), (5.64), (5.67)).

Достаточные условия существования инвариантной плоскости предполагают неразрешимость уравнения

$$\left(\mathbf{X},\left[\xi_2,\xi_1\right]\right)\Big|_{\xi_1=\xi_1(\mathbf{X}_2),\ \xi_2=\mathbf{X}_2}=0$$

относительно целочисленных координат вектора $\mathbf{X}$ решетки γ, неразложимого по базисным векторам $\xi_1=\xi_1(\mathbf{X}_2)$, $\xi_2=\mathbf{X}_2$ решетки ξ^2.

Заключение

Результаты проведенного исследования свидетельствуют о том, что сформулированные Г. В. Курдюмовым представления о картине атомных смещений, свойственной мартенситному механизму превращения, и представления о деформации кристаллической решетки при мартенситном превращении, вытекающие из фундаментальной работы А. Б. Гренингера и А. Р. Трояно [18], являются основополагающими в логической схеме кристаллографической теории $\gamma - \alpha$ мартенситного превращения.

Определение мартенситного механизма превращения, предложенное Г. В. Курдюмовым, позволяет строго решить задачу о построении симметричной части преобразования, ответственной за собственно деформацию одной решетки в другую в предположении об однородности деформационного преобразования.

Экстремальные геометрические принципы (минимальной деформации или максимальной близости решеток) ключевыми не являются, хотя и полезны для понимания геометрического смысла вкладов от симметричной и ортогональной составляющих преобразования.

Так, принцип максимальной близости решеток указывает на выделенность тех вариантов деформационного преобразования решеток и тех вариантов ориентационного соответствия между ними, которые заведомо определяются взаимным расположением узлов в каждой из решеток в отдельности и описываются симметричными тензорами.

Все другие варианты ориентационного соответствия решеток следует объяснять исходя из принципов, имеющих физическое обоснование.

В качестве одного из таких принципов принимается принцип наименьшего проигрыша в энергии упругих напряжений, который согласуется с выводами А. Б. Гренингера и А. Р. Трояно [18] и допускает формулировку в виде постулата о деформации с инвариантной плоскостью, что расширяет возможности геометрического подхода к изучению кристаллографии мартенситного превращения.

Реализация этих возможностей требует математического инструментария, отвечающего содержанию идей А. Б. Гренингера и А. Р. Трояно. Эти идеи геометрически наглядно выражаются в рамках формализма, основанного на понятиях ориентационных инвариантов деформационного преобразования и преобразования размерности инвариантных подпространств. Использование его позволяет простым образом связать строение решеток превращающихся фаз с собственными значениями и инвариантными подпространствами, характерными для тензора, отображающего одну решетку в другую, указать ограничения на параметры ортогональной составляющей деформационного преобразования, установить зависимость между размерностью инвариантных подпространств, собственно деформацией решетки и дополнительной деформацией (деформацией при инвариантной решетке, по общепринятой терминологии), преобразующей одномерное инвариантное подпространство – ориентационно неизменную плоскость в двухмерное – инвариантную плоскость. В результате задачи о построении составляющих деформационного преобразования с инвариантной плоскостью расцепляются и каждая из них разрешается в явном виде.

Найденные решения определяют ортогональное преобразование, ориентацию инвариантной плоскости и дополнительную деформацию как функции независимых параметров, причем дополнительная деформация однородна и односдвиговой, вообще говоря, не является.

Элемент произвола, связанный с выбором значений этих параметров, можно ограничить, если от континуального описания ориентационных инвариантов перейти к дискретному.

Использование дискретных моделей – решеток X и r, отвечающих представлениям о кристаллическом строении фаз, испытывающих превращение, позволяет выделять семейства $\{\Pi_3\}$ ориентационно неизменных плоскостей Π_3, каждая из которых содержит двумерную решетку ξ^2, состоящую из узлов преобразуемой решетки X и в том числе из узлов задаваемого наперед кристаллографического направления $\mathbf{\Gamma}_2$.

Решетка ξ^2 – инвариант деформационного преобразования **L** решетки X в решетку r в том смысле, что она совмещается сама с собой при деформации **L**. Период ее в направлении $\mathbf{\Gamma}_2$ совпадает с периодом преобразуемой решетки, если параметры решеток, связанных преобразованием, и их взаимная ориентация подчиняются определенным ограничениям.

Вместе с тем периоды решетки ξ^2 и двухмерной решетки (обозначим ее X^2), состоящей из узлов преобразуемой решетки, принадлежащих той же плоскости Π_3, могут и не совпадать в других направлениях. В этом случае решетка ξ^2 будет всего лишь подрешеткой решетки X^2 и с решеткой X^2 не отождествима. Последнее означает, что решетка X^2 при деформации **L** самосовмещаться не может, а стало быть не существует и дополнительной деформации **D**, способной восстановить исходное расположение узлов преобразуемой решетки X в плоскости Π_3 и обеспечить при том самосовмещение узлов преобразованной решетки r в плоскости Π_3. Ориентационно неизменная плоскость Π_3, содержащая такую решетку ξ^2, как инвариантная плоскость не реализуема, если под инвариантной плоскостью подразумевать кристаллографическую плоскость решетки X, узлы которой не изменяют своих положений в результате деформационного преобразования **DL**.

Инвариантную плоскость, понимаемую таким образом, можно назвать строго инвариантной. Тогда постулат о деформационном преобразовании **DL** с инвариантной (в строгом смысле) плоскостью формулируется как постулат о деформационном преобразовании **L**, допускающем самосовместимую решетку ξ^2, тождественную решетке X^2.

Частично инвариантной, или инвариантной в слабом смысле можно назвать плоскость, для которой характерно существование узлов, также не изменяющих своих положений при деформационном преобразовании **DL**, но эти узлы не исчерпывают решетки X^2, образуя лишь ее подрешетку. С точки зрения такого определения преобразование решетки X в решетку r посредством деформации с инвариантной плоскостью оказывается возможным, если найдется деформационное преобразование **L**, допускающее самосовместимую подрешетку ξ^2 решетки X^2.

Таким образом, для описания перестройки решетки X в решетку r как деформационного преобразования с инвариантной плоскостью, в строгом или слабом смысле, требуется определенное соответствие между решетками X и r, допускающее существование в решетке X плоских двумерных решеток или подрешеток, самосовместимых при деформации **L**.

В случае $\gamma \rightarrow \alpha$ деформационного преобразования при собственно деформации γ-решетки по Бейну это требование предполагает в качестве необходимого условия [1] разрешимость уравнений

$$\xi_1 = \xi_1(\mathbf{X}_2),\ \xi_2 = \mathbf{X}_2 \qquad (*)$$

относительно базисных векторов решетки ξ^2 в классе векторов решетки γ и кристаллографических направлений $\mathbf{\Gamma}_2 = \mathbf{X}_2/|\mathbf{X}_2|$ решетки γ, инвариантных относительно $\gamma \rightarrow \alpha$ преобразования.

Уравнения (*) имеют решения при некоторых $\mathbf{X}_2$, что свидетельствует о возможности дискретного описания ориентационных инвариантов $\gamma \rightarrow \alpha$ преобразования, основанного на моделях самосовместимой решетки ξ^2, но решений этих бесконечно много. Число решений становится конечным, если ограничиться решениями в классе взаимно ортогональных векторов решетки γ (прямоугольные решетки ξ^2), имеющих минимальную длину в соответствующих им кристаллографических направлениях. Одна-

[1] Условия существования решеток ξ^2 в ориентационно неизменных плоскостях Π_3.

ко в этом классе нет решений, определяющих базисные векторы прямоугольной решетки ξ^2, отождествимые с базисными векторами решетки γ^2, принадлежащей плоскости Π_3.

Решения, определяющие базисные векторы прямоугольной решетки ξ^2, отождествимой с решеткой γ^2, не обнаружены и в классе неортоганальных векторов решетки γ (непрямоугольные решетки ξ^2), имеющих минимальную длину в соответствующих им кристаллографических направлениях, если один из них, а именно – ξ_2, не превосходит по модулю пяти параметров a_γ решетки γ.

Таким образом соответствие между решетками γ и α допускает возможность описания $\gamma \to \alpha$ деформационного преобразования при собственно деформации γ-решетки по Бейну, как деформации с инвариантной плоскостью, в слабом смысле.

Что же касается деформации с инвариантной плоскостью, в строгом смысле, то о применимости ее для описания $\gamma \to \alpha$ преобразования с полной определенностью пока судить трудно, поскольку открытым остается вопрос о разрешимости уравнений (1) в классе неортогональных векторов решетки γ, отождествимых с базисными векторами плоских двухмерных решеток γ^2, периоды которых превосходят $5a_\gamma$.

Установлено, однако, что число решений (если уравнения (*) имеют решения при некотором $\mathbf{X}_2$, где $|\mathbf{X}_2| > 5a_\gamma$) конечно. Поэтому разрешимость уравнений (3.1) при заданном $\mathbf{X}_2$ допускает проверку путем прямых вычислений.

Выбор задаваемого вектора $\mathbf{X}_2$, длина и направление которого неизменны при $\gamma \to \alpha$ преобразовании, должен подчиняться довольно сильным ограничениям. Последние выделяют векторы $\mathbf{X}_2$ достаточно большой по сравнению с $a_\gamma/2$ длины, а длина вектора ξ_1 заметно превосходит длину вектора $\xi_2 = \mathbf{X}_2$. Следовательно, инвариантным плоскостям, в строгом смысле, если только они существуют, свойственна плотность узлов, малая по сравнению с плотностью узлов в плоскостях $\{111\}_\gamma$. Сопряжение решеток превращающихся фаз по таким плоскостям – возможно, и не лучший вариант, если исходить из выигрыша в энергетических затратах на образование границы фаз. Однако исследование соответствия решеток γ и α с точки зрения требований, определяющих условия существования инвариантной плоскости, в строгом смысле, при известных из эксперимента параметрах решеток, представляется разрешимой задачей и оправдывается, если иметь в виду состоятельность постулата о деформации с инвариантной плоскостью.

Библиографический список

1. *Курдюмов Г. В., Утевский Л. М., Энтин Р. И.* Превращения в железе и стали. – М.: Наука, 1977. – 238 с.

2. *Курдюмов Г. В.* Явления закалки и отпуска стали. – М.: Металлургиздат, 1960. – 64 с.

3. *Уманский Я. С., Скаков Ю. А.* Физика металлов. - М.: Атомиздат, 1978. – 352 с.

4. *Лысак А. И., Николин Б. И.* Физические основы термической обработки стали. – Киев: Техника, 1975. – 304 с.

5. Закалка стали в магнитном поле / *М. А. Кривоглаз, В. Д. Садовский, Л. В. Смирнов* и др. – М.: Наука, 1977. – 120 с.

6. *Петров Ю. Н.* Дефекты и бездиффузионное превращение в стали. – Киев: Наук. думка, 1978. – 262с.

7. *Бернштейн М. Л., Займовский В. А., Капуткина Л. М.* Термомеханическая обработка стали. – М.: Металлургия, 1983. – 480 с.

8. *Кащенко М. П.* Волновая модель роста мартенсита при $\gamma \rightarrow \alpha$ превращении в сплавах железа / УИФ «Наука». – Екатеринбург, 1993. – 224 с.

9. *Пушин В. Г., Кондратьев В. В., Хачин В. Н.* Предпереходные явления и мартенситные превращения. – Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 1998. – 368 с.

10. *Ройтбурд А. Л.* Современное состояние теории мартенситных превращений // Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения. – М.: Наука, 1972. – С. 7 – 32.

11. *Ройтбурд А. Л., Эстрин Э. П.* Мартенситные превращения // Итоги науки и техники. Металловедение и термическая обработка. – М.: ВИНИТИ, 1970. – С. 5 – 102.

12. *Roytburd A. L.* Martensitic transformation as a typical phase transformation in solids // Solid states physics: advances in research and application. – N. Y.: Acad. Press, 1978. – Vol. 33. – P. 317 – 390.

13. *Винтайкин Е. З.* Мартенситные превращения // Итоги науки и техники. Металловедение и термическая обработка. – М.: ВИНИТИ, 1983. – С. 3 – 63.

14. *Кондратьев В. В., Пушин В. Г.* Предмартенситные состояния в металлах, сплавах и их соединениях: экспериментальные результаты, модели структуры, классификация // Физика металлов и металловедение. – 1985. – Т. 60, № 4. – С. 629 – 650.

15. *Кристиан Дж. У.* Фазовые превращения // Физическое металловедение. – М.: Мир, 1968. – Вып. 2. – С. 227 – 346.

16. *Верещагин В. П., Горелов Е. Н.* Геометрическое обоснование моделей однородного деформационного преобразования кристаллических решеток, допускающего инвариантную плоскость. – Екатеринбург: Изд-во Рос. гос. проф.-пед. ун-та, 2003. – 134 с.

17. *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. – М.: Мир, 1985. – 352 с.

18. *Greninger A. B., Troiano A. R.* The mechanism of martensite formation // Trans. Metall. Soc. AIME. – 1949. – Vol. 185. – P. 590 – 597.

19. *Wechsler M. S., Lieberman D. S., Read T. A.* // Trans. Metall. Soc. AIME. – 1953. – Vol. 197. – P. 1503 .

20. *Bowles J. S., Mackenzie J. K.* // Acta Met. – 1954. – Vol. 2. – P. 129, 138, 224.

21. *Верещагин В. П., Горелов Е. Н.* Описание перестройки решетки при мартенситном $\gamma \rightarrow \alpha$ превращении в сплавах железа в представлении ориентационно неизменных плоскостей // Эволюция дефектных структур в конденсированных средах: Тез. докл. конф., г. Барнаул, 19 – 23 нояб. 2001 г. / Под ред. М. Д. Старостенкова; Алтай. гос. техн. ун-т им. И. И. Ползунова. – Барнаул, 2001. – С. 184 – 185.

Исследование зависимости, связывающей натуральную переменную N_{13} и задаваемые параметры m_{23}, M_2, $|k|$

Функции (3.75) при заданном $\mathbf{X}_2$ (см. (3.13)) могут принимать значения, отвечающие требованию целочисленности и требованию (3.100), лишь при выделенных значениях натуральной переменной N_{13}, которые зависят от m_{23}, M_2, $|k|$. Установим вид этой зависимости исходя из разложений m_{23} и M_2 на простые множители.

Пусть P – простое натуральное число, отличное от 1 и 2. Пусть P входит в разложение на множители целочисленной координаты m_{23} в степени a:

$$|m_{23}| = P^a m \ , \tag{П1.1а}$$

где a и m – натуральные числа; P и m – взаимно простые.

Предположим также, что

$$M_2 = P^{a'} M \ , \tag{П1.1б}$$

где a' – неотрицательное целое число; P и M – взаимно простые.

В отношении значений целочисленных координат m_{21}, m_{22} вектора $\mathbf{X}_2$ в этом случае можно утверждать следующее:

1) Значения координат m_{21}, m_{22} не должны содержать общий множитель, равный P. Наличие такого множителя в разложениях m_{21}, m_{23} на простые множители означало бы, что вектор $\mathbf{X}_2$ не удовлетворяет требованию (3.97).

2) Значения координаты $m_{21}(m_{22})$ при взаимно простых m_{22} и P (m_{21} и P) не может содержать множитель P, если $a'>0$, поскольку предположение $m_{21} = P^{a_{21}} m'_{21}$ при натуральном a_{21} и взаимно простых m'_{21}, P предполагает, в свою очередь, справедливость равенства $m_{22}^2 = P^{a'}M - P^{2a}m^2 - P^{2a_{21}}m'^2_{21}$, следующего из (3.15), (П1.1), которое невыполнимо при взаимно простых m_{22} и P.

3) Значение координаты $m_{21}(m_{22})$ может содержать множитель P при взаимно простых m_{22} и P (m_{21} и P), если $a' = 0$, т. е. при взаимно простых P и M_2.

1. Пусть целочисленный показатель степени a' в (П1.1б) отвечает условиям

$$0 \le a' < 2a \ . \tag{П1.2}$$

Рассмотрим функцию (3.76). Подстановка (П1.1) в (3.76) приводит к выражению $\tilde{\xi}_1 = \dfrac{MN_{13}(N_{13} + P^a|k|m)}{P^{2a-a'}m^2}$. Множитель $P^{2a-a'}$ в его знаменателе несократим и $\tilde{\xi}_1$ не имеет целочисленных значений, если N_{13} и P – взаимно простые, так как $N_{13} + P^a|k|m$ и P – взаимно простые при взаимно простых N_{13} и P. Учитывая это, следует положить

$$N_{13} = P^{a''}N \,, \tag{П1.3}$$

где a'' - натуральное число, N и P – взаимно простые.

Тогда

$$\tilde{\xi}_1 = \frac{P^{2a''}MN(N + P^{a-a''}|k|m)}{P^{2a-a'}m^2} \,, \tag{П1.4}$$

если $1 \le a'' < a$, и

$$\tilde{\xi}_1 = P^{a''-a+a'}MN(P^{a''-a}N + |k|m)/m^2 \,,$$

если $a'' \ge a$.

Множитель $P^{2a-a'}$ в знаменателе формулы (П1.4) сократим, если $2a'' \ge 2a - a'$, так как P и $N + P^{a-a''}|k|m$ – взаимно простые.

Рассмотрим функцию (3.77). Подстановка (П1.1), (П1.3) в (3.77) приводит к выражению

$$|k|\beta c = P^{-a}m^{-1}\{P^{a'+a''}MN[P^{a''}N(P^{a'}M - 2P^{2a}m^2) +$$
$$+P^a|k|m(P^{a'}M - P^{2a}m^2)]\}^{1/2} \,.$$

Пусть

$$0 < a' < 2a \,,$$
$$1 \le a'' < a, \;\; 2a'' \ge 2a - a' \,. \tag{П1.5}$$

Тогда

$$|k|\beta c = P^{a'-(a-a'')}R_1'' \,, \tag{П1.6}$$

где $a' - (a - a'') > 0$, так как $a' \ge 2(a - a'')$ в силу (П1.5);

$$R_1'' = m^{-1}\sqrt{MN[N(M - 2P^{2a-a'}m^2) + P^{a-a''}|k|m(M - P^{2a-a'}m^2)]} \,,$$

причем R_1'' и P – взаимно простые, так как m и P, M и P, N и P, $M - 2P^{2a-a'}m^2$ и P – взаимно простые, а $a - a'' > 0$.

Подставляя теперь (П1.1), (П1.3), (П1.6) в (3.75а), (3.75б), получим:

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{P^{2a-a'}m_{21}mN + s\eta m_{22}R_1''}{P^{a-a''}(M - P^{2a-a'}m^2)} \,, \tag{П1.7а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{P^{2a-a'} m_{22} mN - s\eta m_{21} R_1''}{P^{a-a''}(M - P^{2a-a'} m^2)} . \qquad (\text{П}1.7б)$$

Множитель $P^{a-a''}$ в знаменателях этих формул несократим (напомним, что m_{21} и P, m_{22} и P – взаимно простые при $a' > 0$). Следовательно, функции (П1.7) не имеют целочисленных значений при a'', удовлетворяющих неравенствам (П1.5).

Пусть $a'' > a$. Тогда $|k|\beta c = P^{a'} R_1'$, где

$$R_1' = m^{-1}\sqrt{P^{a''-a} MN[P^{a''-a} N(M - 2P^{2a-a'} m^2) + |k| m(M - P^{2a-a'} m^2)]} ;$$

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{P^{a+a''-a'} m_{21} mN + s\eta m_{22} R_1'}{M - P^{2a-a'} m^2} ; \qquad (\text{П}1.8а)$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{P^{a+a''-a'} m_{22} mN - s\eta m_{21} R_1'}{M - P^{2a-a'} m^2} ; \qquad (\text{П}1.8б)$$

$$\tilde{\xi}_{13} = P^{a''} \eta_k s\eta N . \qquad (\text{П}1.8в)$$

Значения функций (П1.8) имеют общий множитель, представляющий собой целочисленную степень нечетного числа P, так как $a + a'' - a' = (2a - a') + (a'' - a) > 0$, $M - P^{2a-a'} m^2$ и P – взаимно простые, а R_1' и P взаимно простыми не являются. Вектор ξ_1, целочисленные координаты которого имеют такой общий множитель, не удовлетворяет требованию (3.100).

Пусть $a'' = a$, тогда будем иметь:

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{P^{2a-a'} m_{21} mN + s\eta m_{22} R_1}{M - P^{2a-a'} m^2} , \qquad (\text{П}1.9а)$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{P^{2a-a'} m_{22} mN - s\eta m_{21} R_1}{M - P^{2a-a'} m^2} , \qquad (\text{П}1.9б)$$

$$\tilde{\xi}_{13} = P^{a} \eta_k s\eta N , \qquad (\text{П}1.9в)$$

где $R_1 = m^{-1}\sqrt{MN[N(M - 2P^{2a-a'} m^2) + |k| m(M - P^{2a-a'} m^2)]}$.

Функции (П1.9) не содержат степеней P в знаменателе и не имеют степеней P в качестве общего множителя при условии, что R_1 и P – взаимно простые. Это условие в принципе выполнимо и выполнимо заведомо, если $|k|$ и P не являются взаимно простыми.

На этом этапе удобно ввести еще две функции:

$$\zeta_1 = (\mathbf{e}_1^{\gamma}, \zeta)/(a_\gamma / 2) = \eta_k s\eta(s\eta \,|\, m_{23} \,|\, \tilde{\xi}_{11} + m_{21}\tilde{\xi}_{13}) , \qquad (\text{П}1.10а)$$

$$\zeta_2 = (\mathbf{e}_2^{\gamma}, \zeta)/(a_\gamma / 2) = \eta_k s\eta(s\eta \,|\, m_{23} \,|\, \tilde{\xi}_{12} + m_{22}\tilde{\xi}_{13}) , \qquad (\text{П}1.10б)$$

используемые при изучении кристаллографии решеток ξ^2. Функции (П1.10) представляют собой отличные от нуля[1] координаты (в единицах $a_\gamma/2$) вектора

$$\boldsymbol{\zeta} = \eta_k s\eta[\mathbf{e}_3^\gamma, [\boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_1]]/(a_\gamma/2) , \qquad (\text{П1.11})$$

лежащего в плоскости векторов $\boldsymbol{\xi}_2 = \mathbf{X}_2$, $\boldsymbol{\xi}_1(\mathbf{X}_2)$.

В рассматриваемом случае функции (П1.10) могут быть выражены в виде:

$$\zeta_1 = P^a\left(m\eta_k\tilde{\xi}_{11} + m_{21}N\right), \quad \zeta_2 = P^a\left(m\eta_k\tilde{\xi}_{12} + m_{22}N\right), \qquad (\text{П1.12})$$

где $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ определяются формулами (П1.9) и принимают целочисленные значения, если целочисленны значения функций $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$.

Таким образом, из разложимости (П1.1) задаваемых параметров m_{23} и M_2 на взаимно простые множители, отвечающие условиям (П1.2), следует разложимость

$$N_{13} = P^a N \qquad (\text{П1.13})$$

на взаимно простые множители P и N тех значений натуральной переменной N_{13}, которым соответствуют значения функций (3.75), совместимые с требованием целочисленности и требованием (3.100), а также существование общего делителя $P^a = |m_{23}|/m$ у целочисленных значений функций (П1.10) в силу (П1.12).

2. Пусть целочисленный показатель степени a' в (П1.1б) отвечает условию

$$a' = 2a . \qquad (\text{П1.14})$$

Тогда разность $M - m_{23}^2$ будет выражаться через разность $M - m^2$: $M - m_{23}^2 = P^{2a}(M - m^2)$, разложение которой на простые множители может содержать целочисленную степень числа P, так как M и P, m и P – взаимно простые. Учитывая это, положим

$$M - m^2 = P^\gamma \Delta, \ \gamma = 0, 1, 2, \ldots, \qquad (\text{П1.15})$$

где P и Δ – взаимно простые.

Натуральную переменную N_{13} выразим в виде функции (П1.3) неотрицательной целочисленной переменной a'' и натуральной переменной N, где N и P – взаимно простые.

---

[1] Координата $\zeta_3 = (\mathbf{e}_3^\gamma, \boldsymbol{\zeta})/(a_\gamma/2) \equiv 0$.

При $a'' > a + \gamma$ будем иметь:

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{P^{a''-(a+\gamma)} m_{21} mN + s\eta m_{22} R'_2}{\Delta}, \qquad (\text{П}1.16\text{а})$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{P^{a''-(a+\gamma)} m_{22} mN - s\eta m_{21} R'_2}{\Delta}, \qquad (\text{П}1.16\text{б})$$

$$\tilde{\xi}_{13} = P^{a''} \eta_k s\eta N, \qquad (\text{П}1.16\text{в})$$

где $R'_2 = m^{-1}\sqrt{P^{a''-(a+\gamma)} MN[P^{a''-(a+\gamma)} N(M - 2m^2) + |k| m\Delta]}$.

Целочисленные значения функций (П1.16) имеют общий множитель, представляющий собой целочисленную степень нечетного числа P, так как R'_2 и P не являются взаимно простыми, поэтому значения целочисленной переменной a'', превосходящие $a + \gamma$, можно исключить из рассмотрения.

Несколько иначе обстоит дело, если $0 \le a'' \le a + \gamma$. В этом случае

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{m_{21} mN + s\eta m_{22} R_2}{P^{a+\gamma-a''} \Delta}, \qquad (\text{П}1.17\text{а})$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{m_{22} mN - s\eta m_{21} R_2}{P^{a+\gamma-a''} \Delta}, \qquad (\text{П}1.17\text{б})$$

$$\tilde{\xi}_{13} = P^{a''} \eta_k s\eta N,$$

где $R_2 = m^{-1}\sqrt{MN[N(M - 2m^2) + P^{a+\gamma-a''} |k| m\Delta]}$.

Множитель $P^{a+\gamma-a''}$ в знаменателях формул (П1.17) исчезает при $a + \gamma - a'' = 0$, а при $a + \gamma - a'' > 0$ сократим, если

$$mNm_{21} + s\eta R_2 m_{22} = P^{a+\gamma-a''} c_{11}, \qquad (\text{П}1.18\text{а})$$

$$-s\eta R_2 m_{21} + mNm_{22} = P^{a+\gamma-a''} c_{12}, \qquad (\text{П}1.18\text{б})$$

где c_{11}, c_{12} – целые числа; m_{21} и P, m_{22} и P – взаимно простые (множитель P не может входить в разложения на множители координат m_{21}, m_{22}, поскольку $a' = 2a > 0$).

Условие, выражаемое системой равенств (П1.18), накладываст ограничения на координаты m_{21}, m_{22}, m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ и переменные N, a''. Так, оно невыполнимо в каждом из следующих случаев:

1) если одна из координат m_{21}, m_{22} равна нулю;

2) если $R_2 = 0$;

3) если R_2 и P не являются взаимно простыми.

Учитывая это, будем полагать далее, что m_{21}, m_{22}, R_2 отличны от нуля, а $M-2m^2$ и P – взаимно простые (R_2 и P – взаимно простые при взаимно простых $M-2m^2$ и P, если $a+\gamma-a''>0$).

Предположим, что при заданных m_{21}, m_{22}, P, m, M, γ, где $a\ge 1$, $\gamma\ge 0$, найдутся N и a'' из интервала $0\le a''<a+\gamma$, а также целые c_{11}, c_{12}, при которых равенства (П1.18) справедливы. Тогда их можно разрешить относительно m_{21}, m_{22} в виде

$$m_{21}=P^{a+\gamma-a''}(mNc_{11}-s\eta R_2c_{12})/d\ , \qquad (\text{П1.19а})$$

$$m_{22}=P^{a+\gamma-a''}(s\eta R_2c_{11}+mNc_{12})/d\ , \qquad (\text{П1.19б})$$

где $\quad d=N\Delta(P^{2\gamma}N\Delta+P^{a+\gamma-a''}|k|mM)/m^2$.

В правой части каждого из равенств (П1.19) содержится множитель $P^{a+\gamma-a''}$, не исчезающий при $a+\gamma-a''>0$; тогда как m_{21} и P, m_{22} и P – взаимно простые. Противоречие устраняется при условии $\gamma>0$, $a''\ge a-\gamma$, когда

$$d=P^{a+\gamma-a''}N\Delta(P^{a''-(a-\gamma)}N\Delta+|k|mM)/m^2\ ,$$

и множитель $P^{a+\gamma-a''}$ в (П1.19) сократим. Функции (П1.10) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1=P^{a''}\zeta_1'',\ \ \zeta_2=P^{a''}\zeta_2'' \qquad (\text{П1.20а})$$

при $a''\le a-1$,

$$\zeta_1=P^{a}\zeta_1',\ \ \zeta_2=P^{a}\zeta_2' \qquad (\text{П1.20б})$$

при $a\le a''\le a+\gamma$.

Здесь

$$\zeta_1''=m_{21}N+P^{a-a''}m(c_{11}/\Delta),\ \ \zeta_2''=m_{22}N+P^{a-a''}m(c_{12}/\Delta)\ ;$$

$$\zeta_1'=P^{a''-a}m_{21}N+m(c_{11}/\Delta),\ \ \zeta_2'=P^{a''-a}m_{22}N+m(c_{12}/\Delta)\ .$$

Итак, из разложимости (П1.1) параметров m_{23}, M_2 на взаимно простые множители при дополнительном условии (П1.14) и разложимости (П1.15) разности $M-m^2$ следует разложимость

$$N_{13}=P^{a''}N \qquad (\text{П1.21})$$

на взаимно простые множители P и N тех значений натуральной переменной N_{13}, которым соответствуют значения функций (3.75), совместимые с требованием целочисленности и требованием (3.100). Здесь целочисленная переменная a'' принимает единственное значение

$a'' = a$ при $\gamma = 0$; (П1.22а)

значения из интервала

$a - \gamma \le a'' \le a + \gamma$ при $1 \le \gamma \le a - 1$ и $a \ge 2$ (П1.22б)

или из интервала

$0 \le a'' \le a + \gamma$ при $\gamma \ge a$, (П1.22в)

если m_{21}, m_{22}, $N(M - 2m^2) + P^{a+\gamma-a''}|k|m\Delta$ отличны от нуля.

Целочисленные значения функций (П1.10) имеют (см. (П1.20)) фиксированный общий делитель P^a при $a'' = a$ $(\gamma = 0)$, $a \le a'' \le a + \gamma$ $(\gamma \ge 1)$ и общий делитель $P^{a''} \ge 1$, зависящий от переменной a'' при $a - \gamma \le a'' \le a - 1$ $(1 \le \gamma \le a - 1,\ a \ge 2)$, $0 \le a'' \le a - 1$ $(\gamma \ge a)$.

3. Пусть целочисленный показатель степени a' в (П1.1б) отвечает условию

$a' > 2a$, (П1.23)

тогда

$$M_2 - m_{23}^2 = P^{2a}(P^{a'-2a}M - m^2) \equiv P^{2a}\Delta ,$$

$$M_2 - 2m_{23}^2 = P^{2a}(P^{a'-2a}M - 2m^2) \equiv P^{2a}D ,$$

где P и Δ, P и D – взаимно простые.

Полагая далее, что N_{13} есть функция целочисленной переменной a'' и натуральной переменной N, определяемая формулой (П1.3), будем иметь:

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{P^{a''}m_{21}mN + s\eta m_{22}R_3''}{P^a\Delta} ,$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{P^{a''}m_{22}mN - s\eta m_{21}R_3''}{P^a\Delta} ,$$

$$\tilde{\xi}_{13} = P^{a''}\eta_k s\eta N ,$$

где $R_3'' = m^{-1}\sqrt{P^{a'-2a+a''}MN(P^{a''}DN + P^a|k|m\Delta)}$.

Пусть $a'' > a$, тогда

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k(P^{a''-a}m_{21}mN + s\eta m_{22}R_3')/\Delta , \quad \text{(П1.24а)}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k(P^{a''-a}m_{22}mN - s\eta m_{21}R_3')/\Delta , \quad \text{(П1.24б)}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = P^{a''}\eta_k s\eta N , \quad \text{(П1.24в)}$$

где $R_3' = m^{-1}\sqrt{P^{a'-2a+a''-a}MN(P^{a''-a}DN + |k|m\Delta)}$.

Целочисленные значения функций (П1.24) имеют несократимый общий множитель, представляющий собой целочисленную степень нечетного числа P, поскольку $a'' - a > 0$, а R'_3 и P не являются взаимно простыми. Поэтому значения целочисленной переменной a'', превосходящие a, можно исключить из рассмотрения.

Пусть $0 \le a'' \le a$, тогда

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{m_{21}mN + s\eta m_{22}R_3}{P^{a-a''}\Delta}, \tag{П1.25а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{m_{22}mN - s\eta m_{21}R_3}{P^{a-a''}\Delta}, \tag{П1.25б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = P^{a''}\eta_k s\eta N ,$$

где $R_3 = m^{-1}\sqrt{P^{a'-2a}MN(DN + P^{a-a''}|k|m\Delta)}$.

Множитель $P^{a-a''}$ в знаменателях формул (П1.25) исчезает, если $a'' = a$, и несократим, если $0 \le a'' < a$, поскольку m_{21}, m_{22} и P – взаимно простые, а R_3 и P таковыми не являются. Поэтому функции (П1.25) при $0 \le a'' < a$ целочисленных значений иметь не могут.

Таким образом, из разложимости (П1.1) параметров m_{23}, M_2 на взаимно простые множители при условии (П1.23) следует разложимость

$$N_{13} = P^a N \tag{П1.26}$$

на взаимно простые множители P и N тех значений натуральной переменной N_{13}, которым соответствуют значения функций (3.75), совместимые с требованием целочисленности и требованием (3.100). Что же касается функций (П1.10), то их целочисленные значения при таких m_{23}, M_2 и N_{13} имеют фиксированный общий делитель $P^a = |m_{23}|/m$, поскольку

$$\zeta_1 = P^a(m_{21}N + m\eta_k\tilde{\xi}_{11}), \quad \zeta_2 = P^a(m_{22}N + m\eta_k\tilde{\xi}_{12}). \tag{П1.27}$$

Допустимые значения переменной α

Перейдем в формулах (3.75) – (3.78) к переменным α, N, исключая N_{13} с помощью (4.56) и заменяя $|m_{23}|$, M_2, $M_2-2m_{23}^2$, $M_2-m_{23}^2$ разложениями (4.44), (4.45), (4.47), (4.49). В результате будем иметь

$$\tilde{\xi}_1 = 2^{\lambda+\alpha} M\mu_1'\mu_2''\mu_3' N(2^{\alpha}\mu_2'' N + 2^{\beta}|k|\mu_2)/2^{2\beta}\ , \tag{П2.1}$$

$$\tilde{\xi}_{11} = \eta_k \frac{2^{\beta+\alpha} m_{21}\rho N + s\eta m_{22} R}{2^{\delta}\rho''\Delta}\ , \tag{П2.2а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \eta_k \frac{2^{\beta+\alpha} m_{22}\rho N - s\eta m_{21} R}{2^{\delta}\rho''\Delta}\ , \tag{П2.2б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\alpha}\eta_k s\eta\mu_1\mu_2''\mu_3 N\ , \tag{П2.2в}$$

$$|k|\beta c = \mu_1'\mu_2\mu_2''\mu_3^2 R\ ,$$

где $R = \frac{1}{2^{\beta}}\sqrt{2^{\lambda+\alpha} M\rho' N(2^{\lambda+\alpha} ND + 2^{\beta+\delta}|k|\rho''\Delta)}$; ρ, ρ' определяются формулами (4.48);

$$\rho'' = \mu_2\mu_2'/\mu_2''\ . \tag{П2.3}$$

Пусть m_{23} – число нечетное. Тогда одна из координат m_{21}, m_{22} будет четным числом, другая – нечетным, а M_2 – удвоенным нечетным числом. В этом случае $\beta=0$, $\lambda=1$, $\delta=0$, D – четное и при $\alpha \ge 2$ целочисленные значения функций (П2.2) не могут удовлетворять требованию (3.100), так как будут иметь общий множитель $2^{\alpha/2}$, если α – четное, и $2^{(\alpha-1)/2}$, если α – нечетное.

Иначе обстоит дело, если α = 0, 1. При α = 0 радикал $R=\sqrt{2M\rho' N(2ND+|k|\rho''\Delta)}$ разрешим в натуральных числах только при четных значениях задаваемого параметра $|k|$ и будет равен удвоенному натуральному числу. Целочисленные значения функций (П2.2) при таком R удовлетворяют требованию (3.100), поскольку $\tilde{\xi}_{11}$ – нечетное, $\tilde{\xi}_{12}$ – четное при нечетном m_{21} и четном m_{22} и, наоборот, при четном m_{21} и нечетном m_{22}, а $\tilde{\xi}_{13}$ – нечетное.

При $\alpha = 1$ радикал $R = 2\sqrt{M\rho' N(4ND + |k|\rho''\Delta)}$ разрешим в натуральных числах как при четных, так и при нечетных значениях параметра $|k|$. Однако при четных $|k|$ значениями R будут удвоенные четные числа. Значения функций (П2.2) при таком R будут иметь несократимый общий множитель 2 и не могут удовлетворять требованию (3.100). Поэтому при $\alpha = 1$ следует ограничиться нечетными значениями задаваемого параметра $|k|$. Целочисленные значения функций (П2.2) при таких $|k|$ должны выражаться удвоенными нечетными числами.

Пусть m_{23} – четное, а m_{21}, m_{22} – нечетные числа. Тогда M_2 – удвоенное нечетное число. Таким m_{23}, M_2 соответствуют $\beta = 1, 2, 3, \ldots$, $\lambda = 1$, $\delta = 1$ (см. формулы (4.44), (4.52)) и нечетное D, поэтому множитель $2^{2\beta}$ в знаменателе формулы (П2.1) сократим и функция (П2.1) принимает удвоенные целочисленные значения, если $\alpha \geq \beta$. Однако целочисленные значения функций (П2.2) будут удовлетворять требованию (3.100) только при $\alpha = \beta$, поскольку при $\alpha > \beta$ целочисленными значениями радикала $R = 2\sqrt{2^{\alpha-\beta} M\rho' N(2^{\alpha-\beta} DN + |k|\rho''\Delta)}$ будут удвоенные четные числа, вследствие чего в формулах (П2.2) появится несократимый общий множитель, представляющий собой число 2 в натуральной степени. Заметим также, что при $\beta \geq 2$ значения задаваемого параметра $|k|$ должны быть четными числами. В противном случае значения функций не удовлетворяют требованию (3.100) из-за общего множителя, равного 2. При $\beta = 1, 2, 3, \ldots$ и четном $|k|$ целочисленные значения функций $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ должны выражаться нечетными числами, а целочисленное значение функции $\tilde{\xi}_{13}$ – четным числом. При $\beta = 1$ и нечетном $|k|$ целочисленные значения функций $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ – удвоенные нечетные числа, если R/4 – четное натуральное число. Если же R/4 – число нечетное, то $\tilde{\xi}_{13}$ – удвоенное нечетное число, а $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ – учетверенные целые числа, одно из которых четное, а другое нечетное.

Пусть m_{21}, m_{22}, m_{23} – четные. Тогда M_2 – учетверенное нечетное число. Таким m_{23} и M_2 соответствуют $\beta = 1, 2, 3, \ldots$, $\lambda = 2$ и нечетное D. При $\beta \geq 2$ выделенными оказываются четные значения задаваемого параметра $|k|$ и единственное значение переменной α, равное β. Целочисленное значение функции $\tilde{\xi}_{13}$ при таких β и $|k|$ выражается нечетным числом, умноженным на 2^{β}, функции $\tilde{\xi}_{11}$ – учетверенным целым числом, а функции $\tilde{\xi}_{12}$ – удвоенным нечетным числом, если m_{21} – удвоенное нечетное число, а m_{22} – учетверенное целое число и, наоборот, если m_{21} – учетверенное целое число, а m_{22} – удвоенное целое число. При $\beta \geq 2$ и нечетных $|k|$ либо функция (П2.1) не имеет четных целочисленных значений, либо целочисленные значения функций (П2.2) не удовлетворяют требованию (3.100).

При $\beta = 1$ (m_{23} – удвоенное нечетное число; m_{21}, m_{22} – удвоенные нечетные числа, либо учетверенные целые числа) целочисленные значения функций (П2.2) расходятся с требованием (3.100), если $\alpha \geq \delta - 1$ из-за общего множителя, представляющего собой натуральную степень числа 2, поэтому значения целочисленной переменной α следует ограничить интервалом

$$1 \leq \alpha \leq \delta - 2 \text{ ,} \tag{П2.4}$$

где δ определяется формулами (4.54).

Формулы (П2.1), (П2.2) при α из интервала (П2.4) можно выразить в виде:

$$\tilde{\xi}_1 = 2^{1+\alpha} M\mu'_1\mu''_2\mu'_3 N(2^{\alpha-1}\mu''_2 N + |k|\mu_2) \text{ ,} \tag{П2.5}$$

$$\tilde{\xi}_{11} = 2^{1+\alpha}\eta_k \frac{m_{21}\rho N + s\eta m_{22} R'}{2^{\delta}\rho''\Delta} \text{ ,} \tag{П2.6а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = 2^{1+\alpha}\eta_k \frac{m_{22}\rho N - s\eta m_{21} R'}{2^{\delta}\rho''\Delta} \text{ ,} \tag{П2.6б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\alpha}\tilde{\xi}'_{13} \text{ ,}$$

где

$$R' = \sqrt{M\rho' N\left(ND + 2^{\delta-1-\alpha}|k|\rho''\Delta\right)} \text{ ;} \tag{П2.7}$$

$$D = \rho' M - 2\rho \text{ ;}$$

$$\tilde{\xi}'_{13} = \eta_k s\eta\mu_1\mu''_2\mu_3 N \text{ .} \tag{П2.8}$$

Функция (П2.5) не имеет значений, равных удвоенному нечетному числу при α из интервала (П2.4), поэтому целочисленные значения функций (П2.6), удовлетворяющие требованию (3.100), должны выражаться четными числами, сумма квадратов которых – учетверенное натуральное число. Функция (П2.5) может принимать значения, равные учетверенному натуральному числу, лишь при $\alpha = 1$ и четных $|k|$. Однако при $\alpha = 1$ функции (П2.6) не могут иметь четных целочисленных значений.

Действительно, пусть $m_{21} \neq 0$, $m_{22} \neq 0$. Координаты m_{21}, m_{22} в этом случае будут выражаться формулами (4.53а). Пусть $\beta_{21} \neq \beta_{22}$, и предположим для определенности, что $\beta_{21} < \beta_{22}$, где $\beta_{21} = 2, 3, 4, \ldots$. Тогда $\delta = 2\beta_{21}$ (см. формулы (4.54а),

$$\tilde{\xi}_{11} = 2^2 \tilde{\xi}'_{11} / 2^{\beta_{21}}\ , \quad \tilde{\xi}_{12} = 2^2 \tilde{\xi}'_{12} / 2^{\beta_{21}}\ , \tag{П2.9а}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2\tilde{\xi}'_{13}\ , \tag{П2.9б}$$

где

$$\tilde{\xi}'_{11} = \eta_k \frac{m'_{21}\rho N + 2^{\beta_{22}-\beta_{21}} s\eta m'_{22} R'}{\rho'' \Delta}\ ; \tag{П2.10а}$$

$$\tilde{\xi}'_{12} = \eta_k \frac{2^{\beta_{22}-\beta_{21}} m'_{22}\rho N - s\eta m'_{21} R'}{\rho'' \Delta}\ ; \tag{П2.10б}$$

функция $\tilde{\xi}'_{13}$ определяется формулой (П2.8) и принимает нечетные целочисленные значения.

При $\alpha = 1$ и $\delta = 2\beta_{21}$ целочисленные значения радикала (П2.7) – нечетные натуральные числа, а целочисленные значения функций (П2.10) – нечетные целые числа. Поэтому функции (П2.9а) не имеют целочисленных значений, которые выражались бы четными целыми числами. Точно так же обстоит дело и при $\beta_{22} < \beta_{21}$, где $\beta_{22} = 2, 3, 4, \ldots$.

Пусть $\beta_{21} = \beta_{22}$, где $\beta_{21} = 1, 2, 3, \ldots$. Тогда $\delta = 2\beta_{21} + 1$ (см. (4.54а)),

$$\tilde{\xi}_{11} = 2^2 \tilde{\xi}''_{11} / 2^{\beta_{21}}\ , \quad \tilde{\xi}_{12} = 2^2 \tilde{\xi}''_{12} / 2^{\beta_{21}}\ , \tag{П2.11а}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2\tilde{\xi}'_{13}\ , \tag{П2.11б}$$

где

$$\tilde{\xi}''_{11} = \eta_k \frac{m'_{21}\rho N + s\eta m'_{22} R'}{2\rho'' \Delta}\ ; \quad \tilde{\xi}''_{12} = \eta_k \frac{m'_{22}\rho N - s\eta m'_{21} R'}{2\rho'' \Delta}\ ; \tag{П2.12}$$

$\tilde{\xi}'_{13}$ определяется формулой (П2.8).

Сумма

$$C_{11} = m'_{21}\rho N + s\eta m'_{22} R' \tag{П2.13а}$$

и разность

$$C_{12} = m'_{22}\rho N - s\eta m'_{21} R' \tag{П2.13б}$$

в формулах (П2.12) при нечетных натуральных ρN, R' и нечетных целых m'_{21}, m'_{22} принимают значения, представляющие собой удвоенные целые числа, одно из которых – число четное, а другое – нечетное. В этом нетрудно убедиться с помощью подстановки $m'_{21}=2m''_{21}+1$, $m'_{22}=2m''_{22}+1$, $\rho N=2n''-1$, $R'=2r''-1$, где m''_{21}, m''_{22} – целые, а n'', r'' – натуральные числа, использование которой приводит к выражениям

$$C_{11}=2C''_{11}\,,\quad C_{12}=2C''_{12}\,, \tag{П2.13в}$$

где

$$C''_{11}=2(n''m''_{21}+s\eta m''_{22}r'')-m''_{21}+n''+s\eta(r''-m''_{22})-\frac{1+s\eta}{2}\,,$$

$$C''_{12}=2(n''m''_{22}-s\eta m''_{21}r'')-m''_{22}+n''+s\eta(m''_{21}-r'')-\frac{1-s\eta}{2}$$

есть целые числа разной четности, поскольку их сумма

$$C''_{11}+C''_{12}=2[m''_{21}(n''-s\eta r''-\frac{1-s\eta}{2})+m''_{22}(n''+s\eta r''-\frac{1+s\eta}{2})+n'']-1$$

есть число нечетное.

Следовательно, целочисленными значениями функций (П2.12), если таковые найдутся, будут четное и нечетное числа. Легко видеть тогда, что функции (П2.11а) при $\beta_{21}\geq 3$ целочисленных значений иметь не могут (множитель $2^{\beta_{21}}$ в знаменателях формул (П2.11а) несократим). При $\beta_{21}=2$ целочисленные значения функций (П2.11) не удовлетворяют требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, а при $\beta_{21}=1$ не удовлетворяют требованию (3.100) из-за общего множителя, равного 2.

Что же касается случаев, когда одна из координат m_{21}, m_{22} вектора $\mathbf{X}_2$ равна нулю (см. формулы (4.53б), (4.53в)), то в этих случаях функции $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ не могут иметь четных целочисленных значений, в чем нетрудно убедиться, обратившись, например, к формулам

$$\tilde{\xi}_{11}=\frac{2^2\eta_k m'_{21}\rho N}{2^{\beta_{21}}\rho''\Delta}\,,\quad \tilde{\xi}_{12}=-\frac{2^2\eta_k s\eta m'_{21}R'}{2^{\beta_{21}}\rho''\Delta}\,, \tag{П2.14}$$

выражающим функции $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ при $m_{21}=2^{\beta_{21}}m'_{21}$, где $\beta_{21}=2, 3, 4, \ldots$, $m_{22}=0$. Функции (П2.14) не имеют целочисленных значений, если $\beta_{21}\geq 3$ (множитель $2^{\beta_{21}}$ в знаменателях формул (П2.14) несократим), а при $\beta_{21}=2$ целочисленными значениями функций (П2.14) будут нечетные целые числа.

Приложение 3

Допустимые значения переменной N

Покажем, что допустимые значения нечетной натуральной переменной N при заданных m_{23} и M_2 ограничены сверху.

Пусть $N = \Delta_1{}^{\alpha_1''} N_1$, где $\alpha_1'' = 0, 1, 2, \dots$, Δ_1 – простое нечетное число, входящее в разложение Δ на простые множители (см. формулы (4.49), (4.50б)); Δ_1 и N_1 – взаимно простые. Пусть $\alpha_1'' > \gamma_1$. Тогда $R = \Delta_1^{\gamma_1} R_1$, где

$$R_1 = \left\{2^{\lambda+\alpha} \Delta_1^{\alpha_1''-\gamma_1} M\rho' N_1 [2^{\lambda+\alpha} \Delta^{\alpha_1''-\gamma_1} DN_1 + 2^{\beta+\delta}|k|\rho''(\Delta / \Delta_1^{\gamma_1})]\right\}^{1/2} / 2^{\beta}$$

и Δ_1 не являются взаимно простыми. Целочисленные значения функций (П2.2) в этом случае будут иметь несократимый общий множитель, представляющий собой Δ_1 в натуральной степени. Следовательно, множитель Δ_1 может входить в разложение на множители значений переменной N в степени, не превышающей γ_1. То же самое можно сказать и о каждом из остальных множителей – Δ_2, Δ_3, ... , Δ_t в разложении (4.50б). Учитывая это, выразим переменную N в виде

$$N = \Delta'' N_t \ , \qquad (П3.1)$$

выделяя явным образом взаимно простые переменные Δ'' и N_t, где

$$\Delta'' = \prod_{n=1}^{t} \Delta_n^{\alpha_n''} \ , \quad \alpha_n'' = 0, 1, 2, \dots, \gamma_n .$$

Значения переменной N_t можно всегда разложить в произведение

$$N_t = \tilde{N}^2 \overline{N}$$

множителей $\tilde{N}^2$ и $\overline{N}$, не обязательно взаимно простых, первый из которых есть произведение простых нечетных чисел, взятых в четных степенях, а второй – произведение простых нечетных чисел, взятых в степени 0 или 1. Легко видеть тогда, что целочисленные значения функций (П2.2) будут удовлетворять требованию (3.100), если $\tilde{N} = 1$, так как

$$R = \Delta'' \tilde{N} \left\{2^{\lambda+\alpha} M\rho' \overline{N} [2^{\lambda+\alpha} D\tilde{N}^2 \overline{N} + 2^{\beta+\delta}|k|\rho''(\Delta / \Delta'')]\right\}^{1/2} / 2^{\beta}$$

и $\tilde{N}$ не являются взаимно простыми, поэтому при $\tilde{N} > 1$ в формулах (П2.2) появляется несократимый общий множитель $\tilde{N}$, отличный от единицы. Следовательно, выбор значений переменной N_t должен исчерпываться значениями $N_t = \overline{N}$. Вместе с тем значения $\overline{N}$, отличные от единицы, также несовместимы с требованием целочисленности функций (П2.2) и требованием (3.100). Действительно, при $\tilde{N} = 1$ и $\overline{N} > 1$ радикал

$$R = \Delta''\left\{2^{\lambda+\alpha} M\rho'\overline{N}\,[2^{\lambda+\alpha} D\overline{N} + 2^{\beta+\delta}|k|\rho''(\Delta/\Delta'')]\right\}^{1/2} / 2^{\beta}$$

неразрешим в натуральных числах, если $\overline{N}$ и M, $\overline{N}$ и $|k|$ – взаимно простые, поскольку $\overline{N}$ и ρ', $\overline{N}$ и $\rho''(\Delta/\Delta'')$ – взаимно простые.

Если же $\overline{N}$ и M, $\overline{N}$ и $|k|$ имеют общие множители, отличные от единицы, то при таких $\overline{N}$ в формулах (П2.2) неизбежно появляется общий множитель, равный произведению множителей, общих для $\overline{N}$ и M, $\overline{N}$ и $|k|$, вследствие чего целочисленные значения функций (П2.2) не могут удовлетворять требованию (3.100).

Таким образом, среди значений переменной N_t единственно выделенным является значение, равное единице, поэтому

$$N = \Delta'' \tag{П3.2}$$

(см. формулу (П3.1)), т. е. допустимые значения переменной N представляют собой значения функции (П3.2) целочисленных переменных α''_n, $n = 1, 2, \ldots t$, ограниченной сверху:

$$\Delta'' \le \Delta''_{max} ,$$

где

$$\Delta''_{max} = \Delta''\big|_{\alpha'_1=\gamma_1,\ \alpha'_2=\gamma_2,\ldots,\ \alpha'_t=\gamma_t} = \Delta\ . \tag{П3.3}$$

Следовательно, ограниченными сверху будут и допустимые значения переменной N.

Зависимость функций (5.22) – (5.25) и координат (5.27) от показателей степени α, r, σ при заданном X_2

Будем полагать, что координата m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ – нечетное целое число, а координаты m_{21}, m_{22} – целые числа, одно из которых четное, другое нечетное. Тогда $\beta = 0$, $\lambda = 1$, $\delta = 0$ и функции (5.23), (5.24) можно выразить формулами:

$$\tilde{\xi}_1 = 2^{\alpha+r} k''k'n''_{13}n'_{13} + \frac{2^{2\alpha} n''^2_{13}n'^2_{13} + 2^{2\sigma} n''^2_g n'^2_g}{2\mu'_1\mu^2_2\mu'_3 M}, \tag{П4.1}$$

$$|k|\beta c = \begin{cases} 2^{\alpha} R_-, & \text{если } 0 \le \alpha \le r-1,\ r \ge 1, \\ 2^{r} R, & \text{если } \alpha = r,\ r \ge 0, \\ 2^{(\alpha+r)/2} R_+, & \text{если } \alpha \ge r+1,\ r \ge 0, \end{cases} \tag{П4.2}$$

где

$$R_- = \sqrt{n''_{13}n'_{13}(An''_{13}n'_{13} + 2^{r-\alpha} k''k'B)}\ ; \tag{П4.3а}$$

$$R = \sqrt{n''_{13}n'_{13}(An''_{13}n'_{13} + k''k'B)}\ ; \tag{П4.3б}$$

$$R_+ = \sqrt{n''_{13}n'_{13}(2^{\alpha-r} An''_{13}n'_{13} + k''k'B)}\ . \tag{П4.3в}$$

Целочисленные значения произведения $An''_{13}n'_{13}$ – четные числа, так как D – четное, $n''_{13}n'_{13}$ и $\rho'M$ – нечетные; значения произведения $k''k'B$ – нечетные натуральные числа. Поэтому целочисленные значения радикала (П4.3а) и радикалов (П4.3б), (П4.3в) должны выражаться, соответственно, четными и нечетными числами.

Рассмотрим по отдельности каждую из областей изменения α, r, выделенных в (П4.2).

Пусть

$\alpha \ge r+1,\ r \ge 0$.

Тогда целочисленные значения функции (П4.2) соответствуют только четным α, r или нечетным α, r. Такие α, r отличаются между собой на четное число, поэтому выделенными следует считать $\alpha \ge r+2,\ r \ge 0$, где α – четное при четном r и нечетное при нечетном r. Функции (5.25) в этом случае будут выражаться формулами:

$$\zeta_1 = 2^{(\alpha+r)/2} Q[2^{(\alpha-r)/2} n''_{13}n'_{13}m_{21} + s\eta m_{22}R_+],$$

$$\zeta_2 = 2^{(\alpha+r)/2}Q[2^{(\alpha-r)/2}n''_{13}n'_{13}m_{22} - s\eta m_{21}R_+] ,$$

$$\zeta_3 = 0 ,$$

где $(\alpha+r)/2 \geq r+1 \geq 1$, $(\alpha-r)/2 \geq 1$, R_+ определяются формулой (П4.3в).

Целочисленные значения функций ζ_1, ζ_2 – удвоенное четное (нечетное), удвоенное нечетное (четное) при нечетном (четном) m_{21} и $\zeta_3 = 0$, удовлетворяющие требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ минимальной длины в соответствующем ему кристаллографическом направлении, – возможны только при

$$\alpha = 2 , \ r = 0 . \qquad (П4.4а)$$

Функции (5.22), (5.23) при таких α, r могут принимать требуемые целочисленные значения, если

$$\sigma \geq 1 . \qquad (П4.4б)$$

Пусть

$$\alpha = r , \ r \geq 0 .$$

Тогда функции (5.25) будут выражаться формулами:

$$\zeta_1 = 2^r Q(n''_{13}n'_{13}m_{21} + s\eta m_{22}R) ,$$

$$\zeta_2 = 2^r Q(n''_{13}n'_{13}m_{22} - s\eta m_{21}R) ,$$

$$\zeta_3 = 0 ,$$

где R определяется формулой (П4.3б).

Функции ζ_1, ζ_2 могут принимать нечетные целочисленные значения, удовлетворяющие при $\zeta_3 = 0$ требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ минимальной длины в соответствующем ему кристаллографическом направлении, только при

$$\alpha = r = 0 , \qquad (П4.5а)$$

а функции (5.22), (5.23) при $\alpha = r = 0$ могут принимать целочисленные значения, если

$$\sigma = 0 . \qquad (П4.5б)$$

Пусть

$$0 \leq \alpha \leq r-1, \ r \geq 1 . \qquad (П4.6)$$

Функция (П4.1) не может иметь четных целочисленных значений, если $\alpha = 0$, $r \geq 1$, $\sigma \geq 0$, так как при $\sigma \geq 1$ множитель 2 в знаменателе формулы (П4.1) не сократим, а при $\sigma = 0$ сумма $n''^2_{13}n'^2_{13} + n''^2_g n'^2_g$ равна удвоенному нечетному числу. Это обстоятельство позволяет исключить значения $\alpha = 0$, $r \geq 1$ из области (П4.6) и перейти к области $1 \leq \alpha \leq r-1$, $r \geq 2$.

Функции (5.25) при таких α, r выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\alpha} Q(n''_{13}n'_{13}m_{21} + s\eta m_{22}R_-) ,$$

$$\zeta_2 = 2^{\alpha} Q(n''_{13}n'_{13}m_{22} - s\eta m_{21}R_-) ,$$

$$\zeta_3 = 0 ,$$

где R_- определяется формулой (П4.3а).

Целочисленные значения их – удвоенное нечетное (четное), удвоенное четное (нечетное) при нечетном (четном) m_{21} и равное нулю, выделенные требованиями, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, имеющего минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, – возможны только при

$$\alpha = 1,\ r \geq 2 . \qquad \text{(П4.7а)}$$

Функции (5.22), (5.23) при таких α, r могут принимать целочисленные значения, если

$$\sigma \geq 1 . \qquad \text{(П4.7б)}$$

Пусть координата m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ – четное, а координаты m_{21}, m_{22} – нечетные целые числа. Тогда $\beta = 1, 2, \ldots$, $\lambda = 1$, $\delta = 1$, функция (5.23) выражается формулой (П4.1), а функция (5.24) – формулами

$$|k|\beta c = \begin{cases} 2^{\alpha} R_-, & \text{если } 0 \leq \alpha \leq r,\ r \geq 0, \\ 2^{r+1} R, & \text{если } \alpha = r+1,\ r \geq 0, \\ 2^{(\alpha+r+1)/2} R_+, & \text{если } \alpha \geq r+2,\ r \geq 0, \end{cases} \qquad \text{(П4.8)}$$

где

$$R_- = \sqrt{n''_{13}n'_{13}(An''_{13}n'_{13} + 2^{r+1-\alpha} k''k'B)} ; \qquad \text{(П4.9а)}$$

$$R = \sqrt{n''_{13}n'_{13}(An''_{13}n'_{13} + k''k'B)} ; \qquad \text{(П4.9б)}$$

$$R_+ = \sqrt{n''_{13}n'_{13}(2^{\alpha-r-1} An''_{13}n'_{13} + k''k'B)} . \qquad \text{(П4.9в)}$$

Целочисленные значения произведения $An''_{13}n'_{13}$ при нечетном D (см. формулы (4.4б), (5.31а)) – нечетные целые числа, а значения произведения $k''k'B$ – нечетные натуральные числа, поэтому целочисленные значения радикалов $R_{\pm}$ и R должны выражаться, соответственно, нечетными и четными числами.

Пусть

$$\alpha \geq r+2,\ r \geq 0 .$$

Целочисленные значения функции (П4.8) соответствуют четному (нечетному) α и нечетному (четному) r. Такие α, r отличаются между собой на нечетное число. Поэтому выделенными следует считать $\alpha \geq r+3$, $r \geq 0$, где α – четное при нечетном r и нечетное при четном r. Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta+[(\alpha+r-1)/2]}Q[2^{(\alpha-r-1)/2}n''_{13}n'_{13}m_{21} + s\eta m_{22}R_+] ,$$

$$\zeta_2 = 2^{\beta+[(\alpha+r-1)/2]}Q[2^{(\alpha-r-1)/2}n''_{13}n'_{13}m_{22} - s\eta m_{21}R_+] ,$$

$$\zeta_3 = 0 ,$$

где $(\alpha+r-1)/2 \geq r+1 \geq 1$; $(\alpha-r-1)/2 \geq 1$; R_+ определяется формулой (П4.9в). Целочисленные значения функций ζ_1, ζ_2, ζ_3 имеют общий делитель 2^ν, причем $\zeta_1/2^\nu$, $\zeta_2/2^\nu$ – нечетные числа, а $\zeta_3/2^\nu$ – четное число.

Здесь

$$\nu = \beta + [(\alpha+r-1)/2] \geq \beta + r + 1 \geq \beta + 1 .$$

Координата

$$n'_1 = \frac{2^\beta \eta_k \mu_1 \mu_2 \mu_3}{2^\nu d} \qquad (П4.10)$$

(см. первую из формул (5.18) и формулу (4.44)) при таком ν целочисленных значений не имеет, поскольку множитель 2^ν в знаменателе не сократим.

Пусть

$$\alpha = r+1, \ r \geq 0 . \qquad (П4.11)$$

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\beta+r}Q(n''_{13}n'_{13}m_{21} + s\eta m_{22}R) , \qquad (П4.12а)$$

$$\zeta_2 = 2^{\beta+r}Q(n''_{13}n'_{13}m_{22} - s\eta m_{21}R) , \qquad (П4.12б)$$

$$\zeta_3 = 0 , \qquad (П4.12в)$$

где R определяется формулой (П4.9б).

Целочисленные значения функций (П4.12) имеют общий делитель 2^ν, причем $\zeta_1/2^\nu$, $\zeta_2/2^\nu$ – нечетные числа, а $\zeta_3/2^\nu$ – четное число, где $\nu = \beta + r \geq \beta$, поэтому множитель 2^ν в знаменателе формулы (П4.10) сократим, если r = 0 и $\nu = \beta$, т. е. в области (П4.11) выделенными являются значения

$$\alpha = 1, \ r = 0 . \qquad (П4.13а)$$

Функции (5.22), (5.23) при таких α, r могут принимать целочисленные значения, если

$$\sigma \geq 1 . \qquad (П4.13б)$$

Пусть

$$0 \le \alpha \le r, \ r \ge 0 . \qquad (П4.14)$$

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\beta-1+\alpha}\zeta_1'', \quad \zeta_2 = 2^{\beta-1+\alpha}\zeta_2'', \quad \zeta_3 = 0 , \qquad (П4.15)$$

где

$$\zeta_1'' = Q(n_{13}''n_{13}'m_{21} + s\eta m_{22}R_-) ; \qquad (П4.16а)$$

$$\zeta_2'' = Q(n_{13}''n_{13}'m_{22} - s\eta m_{21}R_-) ; \qquad (П4.16б)$$

R_- определяется формулой (П4.9а).

Целочисленными значениями функций (П4.16) при нечетных $n_{13}''n_{13}'$, m_{21}, m_{22}, R_- будут удвоенные целые числа (обозначим их C_1, C_2), одно из которых четное, а другое нечетное (см. прил. 2 и формулы (П2.13)), т. е. $\zeta_1'' = 2C_1$, $\zeta_2'' = 2C_2$.

Следовательно, целочисленные значения функций (П4.15) имеют общий делитель 2^ν, причем $\zeta_1/2^\nu = 2C_1$, $\zeta_2/2^\nu = 2C_2$, $\zeta_3/2^\nu = 0$ – четные числа, где $\nu = \beta - 1 + \alpha \ge 0$, поэтому множитель 2^ν в знаменателе формулы (П4.10) сократим, если $\alpha = 0$, $r = 0$ или $\alpha = 0, 1$, $r \ge 1$.

Пусть

$\alpha = 0$, $r = 0$.

Тогда функция

$$\tilde{\xi}_1 = k''k'n_{13}''n_{13}' + \frac{n_{13}''^2 n_{13}'^2 + 2^{2\sigma} n_g''^2 n_g'^2}{2\mu_1'\mu_2^2\mu_3'M}$$

может принимать четные целочисленные значения, если $\sigma = 0$.

Функции (5.22) при $\alpha = 0$, $r = 0$, $\sigma = 0$ выражаются формулами:

$$\tilde{\xi}_{11} = \frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}(C_1 - m_{21}\,|U'|\,N''), \quad \tilde{\xi}_{12} = \frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}(C_2 - m_{22}\,|U'|\,N''),$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^\beta U'N'' ,$$

где

$$N'' = (n_{13}''n_{13}' - \eta_k\eta_g n_g'' n_g')/2 . \qquad (П4.17)$$

Если функции $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ имеют целочисленные значения, то одно из них – число четное, другое – нечетное, поскольку отличаются они на нечетное число. Действительно, разность

$$\tilde{\xi}_{11} - \tilde{\xi}_{12} = \frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}[(C_1 - C_2) - |U'|(m_{21} - m_{22})N'']$$

при целочисленных $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ – число нечетное, так как $C_1 - C_2$ и $m_{21} - m_{22}$ – соответственно, нечетное и четное числа. Вектор $\boldsymbol{\xi}_1$, одна из целочисленных координат которого – число нечетное, а другие две – числа четные, вектором решетки γ быть не может.

Пусть

$\alpha = 0, 1, \ r \geq 1.$

При $\alpha = 0, \ r \geq 1$ функция $\tilde{\xi}_1$ не имеет (см. формулу (П4.1)) четных целочисленных значений и может иметь целочисленные значения, равные учетверенному четному числу, если $\alpha = 1, \ r \geq 2, \ \sigma = 1$, или удвоенному нечетному числу, если $\alpha = 1, \ r \geq 1, \ \sigma \geq 2$.

Следовательно, в области (П4.14) выделенными являются

$$\alpha = 1, \ r \geq 2, \ \sigma = 1 \ , \tag{П4.18а}$$

а также

$$\alpha = 1, \ r \geq 1, \ \sigma \geq 2 \ . \tag{П4.18б}$$

Пусть координата m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ – учетверенное целое число, а координаты m_{21}, m_{22} – четные целые числа. Тогда $\beta = 2, 3, \ldots$, $\lambda = 2$, $\delta = 2$ и функции (5.23), (5.24) можно выразить формулами:

$$\tilde{\xi}_1 = 2^{\alpha+r} k'' k' n''_{13} n'_{13} + \frac{2^{2\alpha} n''^2_{13} n'^2_{13} + 2^{2\sigma} n''^2_g n'^2_g}{4\mu'_1 \mu_2^2 \mu'_3 M} \ , \tag{П4.19}$$

$$|k|\beta c = \begin{cases} 2^{\alpha} R_-, & \text{если } 1 \leq \alpha \leq r+1, \ r \geq 0, \\ 2^{r+2} R, & \text{если } \alpha = r+2, \ r \geq 0, \\ 2^{(\alpha+r+2)/2} R_+, & \text{если } \alpha \geq r+3, \ r \geq 0, \end{cases} \tag{П4.20}$$

где

$$R_- = \sqrt{n''_{13} n'_{13} (A n''_{13} n'_{13} + 2^{r+2-\alpha} k'' k' B)} \ ; \tag{П4.21а}$$

$$R_+ = \sqrt{n''_{13} n'_{13} (2^{\alpha-r-2} A n''_{13} n'_{13} + k'' k' B)} \ ; \tag{П4.21б}$$

R определяется формулой (П4.9б).

Значение $\alpha = 0$ исключается, поскольку функция (П4.19) не имеет целочисленных значений при $\alpha = 0$ (множитель 4 в знаменателе формулы (П4.19) не сократим). Целочисленные значения радикалов $R_\pm$ и R должны выражаться, соответственно, нечетными и четными числами, как и в предыдущем случае.

Пусть $\alpha \geq r+3, \ r \geq 0$.

Целочисленные значения функции (П4.20) соответствуют только четным или только нечетным α, r. Такие α, r отличаются между собой на четное число. Поэтому выделенными следует считать $\alpha \ge r+4,\ r \ge 0$, где α – четное при четном r и нечетное при нечетном r. Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta+[(\alpha+r-2)/2]} Q[2^{(\alpha-r-2)/2} n''_{13} n'_{13} m_{21} + s\eta m_{22} R_+] ,$$

$$\zeta_2 = 2^{\beta+[(\alpha+r-2)/2]} Q[2^{(\alpha-r-2)/2} n''_{13} n'_{13} m_{22} - s\eta m_{21} R_+] ,$$

$$\zeta_3 = 0 ,$$

где $(\alpha+r-2)/2 \ge r+1 \ge 1$; $(\alpha-r-2)/2 \ge 1$; R_+ определяется формулой (П4.21б).

Целочисленные значения функций ζ_1, ζ_2, ζ_3 имеют общий делитель 2^ν, причем $\zeta_1/2^\nu$, $\zeta_2/2^\nu$, $\zeta_3/2^\nu$ – четные, где

$$\nu = \beta + [(\alpha+r-2)/2] \ge \beta + r + 1 \ge \beta + 1 .$$

Координата (П4.10) при таком ν целочисленных значений иметь не может.

Пусть

$$\alpha = r + 2,\ r \ge 0 . \tag{П4.22}$$

Тогда

$$\zeta_1 = 2^\beta Q(n''_{13} n'_{13} m_{21} + s\eta m_{22} R) , \tag{П4.23а}$$

$$\zeta_2 = 2^\beta Q(n''_{13} n'_{13} m_{22} - s\eta m_{21} R) , \tag{П4.23б}$$

$$\zeta_3 = 0 , \tag{П4.23в}$$

где R определяется формулой (П4.9б).

Целочисленные значения функций (П4.23) имеют общий делитель 2^ν, причем $\zeta_1/2^\nu$, $\zeta_2/2^\nu$, $\zeta_3/2^\nu$ – четные числа, где $\nu = \beta + r \ge \beta$, поэтому множитель 2^ν в знаменателе формулы (П4.10) сократим, если r = 0 и $\nu = \beta$, т. е. в области (П4.22) выделенными являются значения $\alpha = 2,\ r = 0$.

Сумма квадратов целочисленных значений функций $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$, отвечающих требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, имеющего минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, должна выражаться либо удвоенным, либо учетверенным нечетным числом. Целочисленных значений функции (П4.19), равных учетверенному нечетному числу, и целочисленных значений функции (5.22), равных четным числам, при

$$\alpha = 2\,,\ r = 0 \tag{П4.24а}$$

можно ожидать, если

$$\sigma = 2\ . \tag{П4.24б}$$

Пусть $1 \le \alpha \le r + 1$, $r \ge 0$.

В этом случае

$$\zeta_1 = 2^{\beta-1+\alpha}\zeta_1'' ,\quad \zeta_2 = 2^{\beta-1+\alpha}\zeta_2'' ,\quad \zeta_3 = 0\ , \tag{П4.25}$$

где

$$\zeta_1'' = Q(n_{13}''n_{13}'m_{21} + s\eta m_{22}R_-)/2\ ; \tag{П4.26а}$$

$$\zeta_2'' = Q(n_{13}''n_{13}'m_{22} - s\eta m_{21}R_-)/2\ ; \tag{П4.26б}$$

R_- определяется формулой (П4.21а).

Множитель 2 в знаменателях формул (П4.26) сократим, поскольку m_{21} – удвоенное нечетное (учетверенное целое), а m_{22} – учетверенное целое (удвоенное нечетное) числа (см. формулы (3.99в), (3.99г)), и целочисленные значения функций (П4.26) выражаются нечетными числами. Целочисленные значения функций (П4.25) имеют тогда общий делитель 2^ν, так как $\zeta_1/2^\nu$, $\zeta_2/2^\nu$ – нечетные числа, а $\zeta_3/2^\nu$ – четное число, где $\nu = \beta - 1 + \alpha \ge 2$, поэтому множитель 2^ν в знаменателе формулы (П4.10) сократим, если $\alpha = 1$ и $r \ge 0$.

Функция (П4.19) при $\alpha = 1$, $r \ge 0$ не имеет четных целочисленных значений, если $\sigma \ge 2$, и может иметь целочисленные значения, равные удвоенному четному числу, если $r = 0$, $\sigma = 1$, и удвоенному нечетному числу, если $r \ge 1$, $\sigma = 1$.

Формулы (5.22) при $\alpha = 1$, $r \ge 0$, $\sigma = 1$ записываются в виде:

$$\tilde{\xi}_{11} = \frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}(\zeta_1'' - m_{21}\,|\,U'\,|\,N'')\ , \tag{П4.27а}$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}(\zeta_2'' - m_{22}\,|\,U'\,|\,N'')\ , \tag{П4.27б}$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^\beta U'N''\ , \tag{П4.27в}$$

где ζ_1'', ζ_2'' определяются формулами (П4.26), а N'' – формулой (П4.17).

Сумма квадратов целочисленных значений функций (П4.27) удвоенным четным числом выражаться не может, поскольку $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ – нечетные при нечетных ζ_1'', ζ_2'' и четных m_{21}, m_{22}, а $\tilde{\xi}_{13}$ – четное. Поэтому функции

(П4.27) при $\alpha=1$, $r=0$, $\sigma=1$ целочисленных значений иметь не могут и выделенными следует считать

$$\alpha=1,\ r\geq 1,\ \sigma=1\ . \qquad (П4.28)$$

Пусть координата m_{23} вектора $\mathbf{X}_2$ – удвоенное нечетное число, а m_{21}, m_{22} – удвоенные нечетные числа либо учетверенные целые числа. Тогда $\beta=1$, $\lambda=2$, значения δ определяются формулами (4.54) в зависимости от задаваемых m_{21}, m_{22}.

Пусть $m_{21}\neq 0$, $m_{22}\neq 0$ и предположим для определенности, что

$$m_{21}=2^{\beta_{21}}m'_{21},\ \ m_{22}=2^{\beta_{22}}m'_{22}\ ,\ \ \beta_{21}<\beta_{22}\ , \qquad (П4.29)$$

где $\beta_{21}=2,3,4,\ldots$, $\beta_{22}=3,4,5,\ldots$, m'_{21}, m'_{22} – нечетные целые числа. Тогда $\delta=2\beta_{21}$. Функция (5.23) в этом случае выражается формулой (П4.19), а функция (5.24) – формулами

$$|k|\beta c=\begin{cases}2^{\alpha}R_{-}, & \text{если } 1\leq\alpha\leq r+2\beta_{21}-1,\ r\geq 0,\\ 2^{r+2\beta_{21}}R, & \text{если } \alpha=r+2\beta_{21},\ r\geq 0,\\ 2^{(\alpha+r)/2+\beta_{21}}R_{+}, & \text{если } \alpha\geq r+2\beta_{21}+1,\ r\geq 0,\end{cases} \qquad (П4.30)$$

где

$$R_{-}=\sqrt{n''_{13}n'_{13}(An''_{13}n'_{13}+2^{r+2\beta_{21}-\alpha}k''k'B)}\ ; \qquad (П4.31а)$$

$$R_{+}=\sqrt{n''_{13}n'_{13}(2^{\alpha-r-2\beta_{21}}An''_{13}n'_{13}+k''k'B)}\ ; \qquad (П4.31б)$$

R определяется формулой (П4.9б).

Целочисленные значения радикалов $R_{\pm}$ и R должны выражаться, соответственно, нечетными и четными числами.

Пусть

$$\alpha\geq r+2\beta_{21}+1,\ \ r\geq 0\ . \qquad (П4.32)$$

Тогда целочисленные значения функции (П4.30) соответствуют только четным α при четном r и нечетным α при нечетном r, удовлетворяющим неравенствам $\alpha\geq r+2(\beta_{21}+1)\geq 6$, $r\geq 0$.

Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1=2^{(\alpha+r)/2+1-\beta_{21}}Q[2^{(\alpha-r)/2-\beta_{21}}n''_{13}n'_{13}m'_{21}+s\eta m'_{22}R_{+}]\ , \qquad (П4.33а)$$

$$\zeta_2=2^{(\alpha+r)/2+1-\beta_{21}}Q[2^{(\alpha-r)/2-\beta_{21}}n''_{13}n'_{13}m'_{22}-s\eta m'_{21}R_{+}]\ , \qquad (П4.33б)$$

$$\zeta_3=0\ , \qquad (П4.33в)$$

где $(\alpha + r)/2 \geq r + \beta_{21} + 1 \geq \beta_{21} + 1$; $(\alpha - r)/2 - \beta_{21} \geq 1$; R_+ определяется формулой (П4.31б).

Целочисленные значения функций ζ_1, ζ_2, ζ_3 имеют общий делитель 2^ν, так как $\zeta_1/2^\nu$, $\zeta_2/2^\nu$, $\zeta_3/2^\nu$ – четные числа, где

$$\nu = (\alpha + r)/2 + 1 - \beta_{21} \geq r + 2 \geq 2 .$$

Координата (П4.10) при таком ν целочисленных значений не имеет. Следовательно, в области (П4.32) нет подходящих значений α, r. В области $\alpha = r + 2\beta_{21}$, $r \geq 0$ подходящих значений α, r также нет, поскольку целочисленные значения функций

$$\zeta_1 = 2^{r+\beta_{21}} 2Q(n''_{13} n'_{13} m'_{21} + 2^{\beta_{22}-\beta_{21}} s\eta m'_{22} R) , \tag{П4.34а}$$

$$\zeta_2 = 2^{r+\beta_{21}} 2Q(2^{\beta_{22}-\beta_{21}} n''_{13} n'_{13} m'_{22} - s\eta m'_{21} R) , \tag{П4.34б}$$

$$\zeta_3 = 0 , \tag{П4.34в}$$

где R определяется формулой (П4.9б), имеют общий делитель 2^ν, где $\nu = r + \beta_{21} \geq \beta_{21}$, а координата (П4.10) при таком ν целочисленных значений иметь не может.

Пусть $1 \leq \alpha \leq r + 2\beta_{21} - 1$, $r \geq 0$.

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\alpha+1-\beta_{21}} \zeta''_1 , \quad \zeta_2 = 2^{\alpha+1-\beta_{21}} \zeta''_2 , \quad \zeta_3 = 0 , \tag{П4.35}$$

где

$$\zeta''_1 = Q(n''_{13} n'_{13} m'_{21} + 2^{\beta_{22}-\beta_{21}} s\eta m'_{22} R_-) ; \tag{П4.36а}$$

$$\zeta''_2 = Q(2^{\beta_{22}-\beta_{21}} n''_{13} n'_{13} m'_{22} - s\eta m'_{21} R_-) ; \tag{П4.36б}$$

R_- определяется формулой (П4.31а).

Функции (П4.35) могут принимать целочисленные значения, если

$$\beta_{21} - 1 \leq \alpha \leq r + 2\beta_{21} - 1, \quad r \geq 0 , \tag{П4.37}$$

но эти значения имеют общий делитель 2^ν, где $\nu = \alpha + 1 - \beta_{21}$, поскольку целочисленные значения функций (П4.36) выражаются нечетными числами, так что в области (П4.37) с требованием целочисленности значений координаты (П4.10) совместимы α, r, удовлетворяющие неравенствам

$$\beta_{21} - 1 \leq \alpha \leq \beta_{21}, \quad r \geq 0 .$$

С другой стороны, функция (П4.19) может иметь целочисленные значения, равные:

1) удвоенному нечетному числу, если:

$\alpha = \beta_{21} - 1$, $r \geq 1$, $\sigma = \beta_{21} - 1$, $\beta_{21} = 2$;

2) удвоенному четному числу, если:
$\alpha=\beta_{21}-1,\quad r=0,\quad \sigma=\beta_{21}-1\ ,\quad \beta_{21}=2\ ;$
3)учетверенному нечетному числу, если:
$\alpha=\beta_{21}-1,\quad r\ge 1,\quad \sigma\ge\beta_{21}\ ,\quad \beta_{21}=3\ ,$
$\alpha=\beta_{21}-1,\quad r=0,\quad \sigma=\beta_{21}-1\ ,\quad \beta_{21}=3\ ,$
$\alpha=\beta_{21}-1,\quad r\ge 0,\quad \sigma=2\ ,\quad \beta_{21}\ge 4\ ,$
$\alpha=\beta_{21},\quad r\ge 1,\quad \sigma\ge\beta_{21}+1\ ,\quad \beta_{21}=2\ ,$
$\alpha=\beta_{21},\quad r=0,\quad \sigma=\beta_{21}\ ,\quad \beta_{21}=2\ ,$
$\alpha=\beta_{21},\quad r\ge 0,\quad \sigma=2\ ,\quad \beta_{21}\ge 3\ .$
Однако функции:

$$\tilde{\xi}_{11}=\frac{\eta_k}{2\mu_1\mu_2\mu_3}\left[2^{\alpha+1-\beta_{21}}\zeta_1''-m_{21}\,|\,U'\,|(N'/2)\right], \qquad (\text{П}4.38\text{а})$$

$$\tilde{\xi}_{12}=\frac{\eta_k}{2\mu_1\mu_2\mu_3}\left[2^{\alpha+1-\beta_{21}}\zeta_2''-m_{22}\,|\,U'\,|(N'/2)\right], \qquad (\text{П}4.38\text{б})$$

$$\tilde{\xi}_{13}=U'(N'/2)\ , \qquad (\text{П}4.38\text{в})$$

где ζ_1'', ζ_2'' определяются формулами (П4.36), а N' – формулой (5.29), при $\alpha=\beta_{21}-1$ целочисленных значений не имеют (не сократим множитель 2 в знаменателях формул (П4.38а), (П4.38б)), а при $\alpha=\beta_{21}$ иметь не могут. Действительно, сумма квадратов значений функций (П4.38), будь они целочисленными при $\alpha+1-\beta_{21}=1$, выражалась бы удвоенным нечетным числом, поскольку $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$ должны быть нечетными, а $\tilde{\xi}_{13}$ четным при нечетных ζ_1'', ζ_2'' и четных m_{21}, m_{22}, $N'/2$. С другой стороны, функция (П4.19) при $\alpha=\beta_{21}$ не имеет целочисленных значений, равных удвоенному нечетному числу.

Таким образом, при m_{21}, m_{22} (П4.29), отличных от нуля, и $\beta_{21}\ne\beta_{22}$ не существует подходящих значений показателей степени α, r, σ. Это утверждение справедливо и в тех случаях, когда одна из координат m_{21}, m_{22} равна нулю. Действительно, при

$$m_{21}=2^{\beta_{21}}m_{21}'\ ,\quad m_{22}=0\ , \qquad (\text{П}4.39)$$

например, где $\beta_{21}=2,3,\ldots$, m_{21}' – нечетное целое число, показатель степени δ принимает те же значения, равные $2\beta_{21}$, что и при m_{21}, m_{22} (П4.29), $\beta_{21}<\beta_{22}$. Поэтому переход от m_{21}, m_{22} (П4.29) к m_{21}, m_{22} (П4.39) формально эквивалентен подстановке $m'_{22} = 0$, а свойства четности или нечетности целочисленных значений функций (П4.19), (П4.30), (П4.31), (П4.33) – (П4.36), (П4.38) при такой подстановке не изменяются.

Пусть m_{21}, m_{22} определяются формулами (П4.29), но $\beta_{21} = \beta_{22}$, где $\beta_{21} = 1, 2, \ldots$. Тогда $\delta = 2\beta_{21} + 1$, функция (5.23) выражается формулой (П4.19), а функция (5.24) – формулами

$$|k|\beta c = \begin{cases} 2^{\alpha} R_-, & \text{если } 1 \le \alpha \le r + 2\beta_{21},\ r \ge 0, \\ 2^{r+2\beta_{21}+1} R, & \text{если } \alpha = r + 2\beta_{21} + 1,\ r \ge 0, \\ 2^{(\alpha+r+1)/2+\beta_{21}} R_+, & \text{если } \alpha \ge r + 2\beta_{21} + 2,\ r \ge 0, \end{cases} \tag{П4.40}$$

где

$$R_- = \sqrt{n''_{13} n'_{13} (A n''_{13} n'_{13} + 2^{r+2\beta_{21}+1-\alpha} k'' k' B)}\ ; \tag{П4.41а}$$

$$R_+ = \sqrt{n''_{13} n'_{13} (2^{\alpha-r-2\beta_{21}-1} A n''_{13} n'_{13} + k'' k' B)}\ ; \tag{П4.41б}$$

R определяется формулой (П4.9б).

Целочисленные значения радикалов $R_{\pm}$ и R должны выражаться, соответственно, нечетными и четными числами.

При

$$\alpha \ge r + 2\beta_{21} + 2,\ r \ge 0 \tag{П4.42}$$

целочисленные значения функции (П4.40) соответствуют только четным α при нечетном r и нечетным α при четном r, удовлетворяющим неравенствам $\alpha \ge r + 2\beta_{21} + 3,\ r \ge 0$.

Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{(\alpha+r+1)/2} Q[2^{(\alpha-r-1)/2-\beta_{21}} n''_{13} n'_{13} m'_{21} + s\eta m'_{22} R_+]\ ,$$

$$\zeta_2 = 2^{(\alpha+r+1)/2} Q[2^{(\alpha-r-1)/2-\beta_{21}} n''_{13} n'_{13} m'_{22} - s\eta m'_{21} R_+]\ ,$$

$$\zeta_3 = 0\ ,$$

где $(\alpha + r + 1)/2 \ge r + \beta_{21} + 4 \ge \beta_{21} + 4$; $(\alpha - r - 1)/2 - \beta_{21} \ge 1$; R_+ определяется формулой (П4.41б).

Целочисленные значения функций ζ_1, ζ_2, ζ_3 имеют общий делитель 2^{ν}, так как $\zeta_1/2^{\nu}$, $\zeta_2/2^{\nu}$ – нечетные, а $\zeta_3/2^{\nu}$ – четное числа, где $\nu = (\alpha + r + 1)/2$. Координата (П4.10) при таком ν целочисленных значений не имеет.

В области

$$\alpha = r + 2\beta_{21} + 1,\ r \ge 0 \tag{П4.43}$$

целочисленные значения функций:

$$\zeta_1 = 2^{r+\beta_{21}+1} Q(n''_{13} n'_{13} m'_{21} + s\eta m'_{22} R) ,$$

$$\zeta_2 = 2^{r+\beta_{21}+1} Q(n''_{13} n'_{13} m'_{22} - s\eta m'_{21} R) ,$$

$$\zeta_3 = 0 ,$$

где R определяется формулой (П4.9б), имеют общий делитель 2^{ν}, где $\nu = r + \beta_{21} + 1 \geq \beta_{21} + 1$, а координата (П4.10) при таком ν целочисленных значений иметь не может.

Следовательно, в областях (П4.42), (П4.43) нет подходящих значений α, r.

Пусть

$$1 \leq \alpha \leq r + 2\beta_{21}, \quad r \geq 0 . \tag{П4.44}$$

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\alpha-\beta_{21}} \zeta''_1 , \quad \zeta_2 = 2^{\alpha-\beta_{21}} \zeta''_2 , \quad \zeta_3 = 0 , \tag{П4.45}$$

где

$$\zeta''_1 = Q(n''_{13} n'_{13} m'_{21} + s\eta m'_{22} R_-) ; \tag{П4.46а}$$

$$\zeta''_2 = Q(n''_{13} n'_{13} m'_{22} - s\eta m'_{21} R_-) ; \tag{П4.46б}$$

R_- определяется формулой (П4.41а).

Целочисленными значениями функций (П4.46) будут удвоенные целые числа, одно из которых четное, а другое нечетное (см. пояснение к целочисленным значениям функций (П4.16)). Поэтому функции (П4.45) могут принимать целочисленные значения, если

$$\beta_{21} \leq \alpha \leq r + 2\beta_{21}, \quad r \geq 0 , \tag{П4.47}$$

но эти значения имеют общий делитель 2^{ν}, где $\nu = \alpha - \beta_{21}$, $0 \leq \alpha - \beta_{21} \leq r + \beta_{21}$, поскольку $\zeta_1/2^{\nu}$, $\zeta_2/2^{\nu}$, $\zeta_3/2^{\nu}$ – четные числа, так что в области (П4.47) с требованием целочисленности значений координаты (П4.10) совместимы α, r, удовлетворяющие неравенствам

$$\beta_{21} \leq \alpha \leq \beta_{21} + 1, \quad r \geq 0 .$$

Функция (П4.19) принимает целочисленные значения, равные:

1) удвоенному нечетному числу, если:

$$\alpha = \beta_{21}, \quad r \geq 1, \quad \sigma = 1 , \quad \beta_{21} = 1 ,$$

2) удвоенному четному числу, если:

$$\alpha = \beta_{21}, \quad r = 0, \quad \sigma = 1 , \quad \beta_{21} = 1 ,$$

3) учетверенному нечетному числу, если:

$$\alpha = \beta_{21}, \quad r \geq 1, \quad \sigma \geq \beta_{21} + 1 , \quad \beta_{21} = 2 ,$$

$\alpha=\beta_{21},\ \ r=0,\ \ \sigma=\beta_{21}\ ,\ \ \beta_{21}=2\ ,$

$\alpha=\beta_{21},\ \ r\geq 0,\ \ \sigma=2\ ,\ \ \beta_{21}\geq 3\ ,$

$\alpha=\beta_{21}+1,\ \ r\geq 1,\ \ \sigma\geq\beta_{21}+2\ ,\ \ \beta_{21}=1\ ,$

$\alpha=\beta_{21}+1,\ \ r=0,\ \ \sigma=\beta_{21}+1\ ,\ \ \beta_{21}=1\ ,$

$\alpha=\beta_{21}+1,\ \ r\geq 0,\ \ \sigma=2\ ,\ \ \beta_{21}\geq 2\ .$

Формулы (5.22) при таких α, r, σ принимают вид:

$$\tilde{\xi}_{11}=\frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}\left[2^{\alpha-\beta_{21}}(\zeta_1''/2)-2^{\beta_{21}-1}m_{21}'\,|U'|(N'/2)\right], \tag{П4.48а}$$

$$\tilde{\xi}_{12}=\frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}\left[2^{\alpha-\beta_{21}}(\zeta_2''/2)-2^{\beta_{21}-1}m_{22}'\,|U'|(N'/2)\right], \tag{П4.48б}$$

$$\tilde{\xi}_{13}=U'(N'/2)\ , \tag{П4.48в}$$

где ζ_1'', ζ_2'' определяются формулами (П4.46), а N' – формулой (5.29).

Целочисленные значения функции $N'/2$ должны выражаться четными числами, а функций $\zeta_1''/2$, $\zeta_2''/2$ – числами разной четности, поэтому при $\alpha=\beta_{21}$ целочисленные значения функций (П4.48) не удовлетворяют требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ.

При $\alpha=\beta_{21}+1$ функции:

$$\tilde{\xi}_{11}=2\frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}\left[(\zeta_1''/2)-2^{\beta_{21}-1}m_{21}'\,|U'|(N'/4)\right],$$

$$\tilde{\xi}_{12}=2\frac{\eta_k}{\mu_1\mu_2\mu_3}\left[(\zeta_2''/2)-2^{\beta_{21}-1}m_{22}'\,|U'|(N'/4)\right],$$

$$\tilde{\xi}_{13}=2U'(N'/4)\ ,$$

могут принимать четные целочисленные значения, удовлетворяющие требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ, имеющего минимальную длину в соответствующем ему кристаллографическом направлении, если $\beta_{21}=1$, $\alpha=2$, $r=0$, $\sigma=2$, а при $\beta_{21}=1$, $\alpha=2$, $r\geq 1$, $\sigma\geq 3$ и при $\beta_{21}\geq 2$, $\alpha=\beta_{21}+1$, $r\geq 0$, $\sigma=2$ целочисленные значения $\tilde{\xi}_{11}$, $\tilde{\xi}_{12}$, $\tilde{\xi}_{13}$ имеют общий множитель 2, поскольку целочисленные значения функции $N'/4$ при таких β_{21}, α, r, σ выражаются нечетными числами и указанным требованиям не удовлетворяют.

Следовательно, при $\beta_{21}=1$ в области (П4.44) выделенными будут

$$\alpha=2\,,\ r=0\,,\ \sigma=2\ . \tag{П4.49}$$

Приложение 5

Зависимость переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от множителей, входящих в разложение M на простые множители

Рассмотрим функцию (5.24) и заметим, что множитель M в знаменателе выражения

$$An_{13}'^2 n_{13}''^2 = \frac{Dn_{13}'^2 n_{13}''^2}{\rho' M}, \tag{П5.1}$$

входящего в (5.24), не сократим при взаимно простых $n_{13}'^2 n_{13}''^2$ и M, если $M \neq 1$, поскольку D и M – взаимно простые.

Будем считать, что $M \neq 1$, и обозначим через M_1 простое нечетное число, входящее в разложение M на множители

$$M = M_1^{\lambda_1} M \tag{П5.2}$$

в натуральной степени λ_1. Пусть n_{13}', k', n_g' и M_1 – взаимно простые, а

$$n_{13}'' = M_1^{a_1} N, \tag{П5.3}$$

$$k'' = M_1^{c_1} K,$$

$$n_g'' = M_1^{b_1} G, \tag{П5.4}$$

где a_1, c_1, b_1 – неотрицательные числа, N, K, G – нечетные натуральные числа, взаимно простые с M_1.

Тогда $An_{13}'^2 n_{13}''^2 = A_1 n_{13}'^2 N^2 M_1^{2a_1} / M_1^{\lambda_1}$,

где

$$A_1 = \frac{D}{\rho' M}$$

и множитель $M_1^{\lambda_1}$ в знаменателе сократим, если $2a_1 \geq \lambda_1$.

Полагая это условие выполненным, будем иметь

$$|k|\beta c = \begin{cases} M_1^{(2a_1-\lambda_1)/2} R_-, & \text{если } 0 \leq 2a_1 - \lambda_1 \leq a_1 + c_1 - 1, \\ M_1^{(2a_1-\lambda_1)/2} R, & \text{если } 2a_1 - \lambda_1 = a_1 + c_1 \geq 1, \\ M_1^{(a_1+c_1)/2} R_+, & \text{если } 2a_1 - \lambda_1 \geq a_1 + c_1 + 1, \end{cases} \tag{П5.5}$$

где

$$R_- = \sqrt{2^\alpha n'_{13}N(2^\alpha A_1 n'_{13}N + M_1^{c_1+\lambda_1-a_1} 2^{\delta+r}Kk'B)}\ ; \qquad (\text{П5.6а})$$

$$R = \sqrt{2^\alpha n'_{13}N(2^\alpha A_1 n'_{13}N + 2^{\delta+r}Kk'B)}\ ; \qquad (\text{П5.6б})$$

$$R_+ = \sqrt{2^\alpha n'_{13}N(2^\alpha M_1^{a_1-\lambda_1-c_1} A_1 n'_{13}N + 2^{\delta+r}Kk'B)}\ ; \qquad (\text{П5.6в})$$

B определяется второй из формул (5.31а).

Пусть

$2a_1 - \lambda_1 \geq a_1 + c_1 + 1$.

Тогда функция (П5.5) может принимать целочисленные значения, если переменные a_1, c_1 удовлетворяют неравенствам

$a_1 \geq c_1 + \lambda_1 + 1,\ c_1 \geq 0$

при нечетном λ_1 и

$a_1 \geq c_1 + \lambda_1 + 2,\ c_1 \geq 0$

при четном λ_1, где a_1 – четное при четном c_1 и нечетное при нечетном c_1, поскольку M_1 и R_+ – взаимно простые.

Функции (5.25) выражаются в этом случае формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} M_1^{(a_1+c_1)/2} Q[2^\alpha M_1^{(a_1-c_1)/2} N n'_{13} m_{21} + s\eta m_{22} R_+]\ , \qquad (\text{П5.7а})$$

$$\zeta_2 = 2^{\beta-\delta} M_1^{(a_1+c_1)/2} Q[2^\alpha M_1^{(a_1-c_1)/2} N n'_{13} m_{22} - s\eta m_{21} R_+]\ , \qquad (\text{П5.7б})$$

$$\zeta_3 = 0\ , \qquad (\text{П5.7в})$$

где $(a_1 - c_1)/2 \geq (\lambda_1 + 1)/2 \geq 1$ при нечетном λ_1 и $(a_1 - c_1)/2 \geq (\lambda_1 + 2)/2 \geq 2$ при четном λ_1; R_+ определяются формулой (П5.6в).

Целочисленные значения функций (П5.7) имеют общий нечетный делитель $d = M_1^{(a_1+c_1)/2}$, где $(a_1 + c_1)/2 \geq (2c_1 + \lambda_1 + 1)/2 \geq (\lambda_1 + 1)/2$ при нечетном λ_1 и $(a_1 + c_1)/2 \geq (2c_1 + \lambda_1 + 2)/2 \geq (\lambda_1 + 2)/2$ при четном λ_1. Координата (П4.10) при таком d целочисленных значений не имеет, поскольку d и $\mu_1\mu_2\mu_3$ – взаимно простые.

Общий делитель, равный M_1 в натуральной степени, характерен для целочисленных значений функций (5.25) и в тех случаях, когда $2a_1 - \lambda_1 = a_1 + c_1 \geq 1$, поскольку при $2a_1 - \lambda_1 \geq 1$ такой делитель имеется как у целочисленных значений функции $|k|\beta c$ (см. формулы (П5.5), (П5.6б)), так и у значений переменной n''_{13} (см. формулу (П5.3)).

Целочисленные значения функции $|k|\beta c$ не имеют делителя, равного M_1, только при четном λ_1 и $a_1 = \lambda_1 / 2$ (см. формулу (П5.5), (П5.6а)), когда $2a_1 - \lambda_1 = 0$, $c_1 \geq 0$.

Показатель степени b_1 (см. (П5.4)) при $a_1 = \lambda_1 / 2$ и $n''_{13} = M_1^{\lambda_1/2} N$ должен принимать значения, удовлетворяющие неравенству $b_1 \geq \lambda_1 / 2$, в противном случае не сократим множитель $M_1^{\lambda_1}$ в знаменателе формулы (5.23). Однако при $b_1 > \lambda_1 / 2$ целочисленных значений не может иметь функция

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\beta-\lambda} U'_1 \, [2^\alpha n'_{13} N - 2^\sigma M_1^{b_1-(\lambda_1/2)} \eta_k \eta_g n'_g G] / M_1^{(\lambda_1/2)} , \qquad (\text{П5.8})$$

где

$$U'_1 = \frac{\eta_k s \eta \mu_1 \mu_3}{\mu'_1 \mu_2 \mu'_3 M} ,$$

поскольку не сократим множитель $M_1^{\lambda_1/2}$ в ее знаменателе.

Целочисленных значений функции (П5.8) можно ожидать только при $b_1 = \lambda_1 / 2$, если разность $2^\alpha n'_{13} N - 2^\sigma \eta_k \eta_g n'_g G$ имеет делитель $M_1^{\lambda_1/2}$.

Таким образом, функции (5.25) и функции (5.22) могут принимать целочисленные значения, удовлетворяющие требованиям, которые предъявляются к целочисленным координатам вектора решетки γ минимальной длины в соответствующем ему кристаллографическом направлении, если множитель M_1 в разложении M (П5.2) на простые множители входит в четной степени, а переменные n''_{13}, n''_g и параметр k'' принимают значения

$$n''_{13} = M_1^{\lambda_1/2} N , \qquad k'' = M_1^{c_1} K , \qquad n''_g = M_1^{\lambda_1/2} G , \qquad (\text{П5.9})$$

где $c_1 \geq 0$, N, K, G – нечетные натуральные числа, взаимно простые с M_1.

Приложение 6

Зависимость переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от множителей, входящих в разложение ρ' на простые множители

Предположим, что в произведении

$$\rho' = \prod_{n=3}^{t_3} \mu_{3n}^{\alpha'_{3n}-2\alpha_{3n}}, \quad \alpha_{3n} = 1, 2, \ldots, \quad \alpha'_{3n} \geq 2\alpha_{3n} + 1 \qquad (\text{П}6.1)$$

(см. формулы (4.48а) и (4.43)) множитель μ_{31} отличен от единицы.

Пусть n'_{13}, n'_g, k' в (5.19) – (5.21) и ρ' – взаимно простые, а

$$n''_{13} = \mu_{31}^{a_{31}} N_{31}, \; n''_g = \mu_{31}^{b_{31}} G_{31}, \; k'' = \mu_{31}^{c_{31}} K_{31},$$

где a_{31}, b_{31}, c_{31} – неотрицательные целые числа;

$$N_{31} = M_1^{\lambda_1/2} N, \; G_{31} = M_1^{\lambda_1/2} G, \; K_{31} = M_1^{c_1} K; \qquad (\text{П}6.2)$$

N, G, K – нечетные натуральные числа, взаимно простые с M_1, μ_{31}; c_1 – неотрицательное целое число.

Значения показателя степени a_{31} должны удовлетворять неравенствам

$$2a_{31} \geq \alpha'_{31} - 2\alpha_{31} \geq 1,$$

в противном случае не сократим множитель $\mu_{31}^{\alpha'_{31}-2a_{31}}$ в знаменателях выражений (5.26), (П5.1). Полагая это условие выполненным, будем иметь

$$|k|\beta c = \begin{cases} \mu_{31}^{a_{31}+\alpha_{31}-(\alpha'_{31}/2)} R_-, & \text{если } \alpha'_{31}/2 - a_{31} \leq a_{31} \leq c_{31} + \alpha'_{31} - 1, \\ \mu_{31}^{c_{31}+\alpha_{31}+(\alpha'_{31}/2)} R, & \text{если } a_{31} = c_{31} + \alpha'_{31}, \\ \mu_{31}^{[(c_{31}+\alpha_{31})/2]+\alpha_{31}} R_+, & \text{если } a_{31} \geq c_{31} + \alpha'_{31} + 1, \end{cases} \qquad (\text{П}6.3)$$

где

$$R_- = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{31} (A_{31} + \mu_{31}^{c_{31}-a_{31}+\alpha'_{31}} B_{31})}\;; \qquad (\text{П}6.4\text{а})$$

$$R = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{31} (A_{31} + B_{31})}\;; \qquad (\text{П}6.4\text{б})$$

$$R_+ = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{31} (\mu_{31}^{a_{31}-c_{31}-\alpha'_{31}} A_{31} + B_{31})}\;; \qquad (\text{П}6.4\text{в})$$

$$A_{31} = 2^\alpha \mu_{31}^{\alpha'_{31}-2\alpha_{31}} A n'_{13} N_{31}, \quad B_{31} = 2^{\delta+r} k' K_{31} B / \mu_{31}^{2\alpha_{31}};$$

A, B определяются формулами (5.31а); A_{31}, B_{31} и μ_{31} – взаимно простые.

Пусть $a_{31} \geq c_{31} + \alpha'_{31} + 1$, $c_{31} \geq 0$. Тогда функция (П6.3) может принимать целочисленные значения, если

$$a_{31} \geq c_{31} + \alpha'_{31} + 1, \; c_{31} \geq 0$$

при нечетном α'_{31} и

$$a_{31} \geq c_{31} + \alpha'_{31} + 2, \; c_{31} \geq 0$$

при четном α'_{31}, где a_{31} – четное при четном c_{31} и нечетное при нечетном c_{31}. Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = \mu_{31}^{(a_{31}+c_{31})/2}\zeta''_1, \quad \zeta_2 = \mu_{31}^{(a_{31}+c_{31})/2}\zeta''_2, \quad \zeta_3 = 0, \tag{П6.5}$$

где

$$\zeta''_1 = 2^{\beta-\delta}Q_{31}[2^{\alpha}\mu_{31}^{(a_{31}-c_{31})/2-\alpha_{31}}n'_{13}N_{31}m_{21} + s\eta m_{22}R_+] \; ;$$

$$\zeta''_2 = 2^{\beta-\delta}Q_{31}[2^{\alpha}\mu_{31}^{(a_{31}-c_{31})/2-\alpha_{31}}n'_{13}N_{31}m_{22} - s\eta m_{21}R_+] \; ;$$

$(a_{31} - c_{31})/2 - \alpha_{31} \geq (\alpha'_{31} - 2\alpha_{31} + 1)/2 \geq 1$ при нечетном α'_{31} и $(a_{31} - c_{31})/2 - \alpha_{31} \geq (\alpha'_{31} - 2\alpha_{31} + 2)/2 \geq 2$ при четном α'_{31}; R_+ определяется формулой (П6.4в), Q_{31} – формулой

$$Q_{31} = \mu_{31}^{\alpha_{31}}Q \; , \tag{П6.6}$$

а Q – формулой (5.31б).

Целочисленные значения функций (П6.5) имеют общий делитель $d = \mu_{31}^{(a_{31}+c_{31})/2}$, где

$$(a_{31} + c_{31})/2 \geq \alpha_{31} + [(2c_{31} + 1 + \alpha'_{31} - 2\alpha_{31})/2] \geq \alpha_{31} + 1$$

при нечетном α'_{31} и

$$(a_{31} + c_{31})/2 \geq \alpha_{31} + [(2c_{31} + 2 + \alpha'_{31} - 2\alpha_{31})/2] \geq \alpha_{31} + 2$$

при четном α'_{31}. Значения координаты (П4.10) при таком d целочисленными быть не могут.

Общий делитель $d = \mu_{31}^{c_{31}+(\alpha'_{31}+1)/2}$ при нечетном α'_{31}, где $c_{31} + (\alpha'_{31} + 1)/2 \geq \alpha_{31} + 1$, и $d = \mu_{31}^{c_{31}+\alpha'_{31}/2}$ при четном α'_{31}, где $c_{31} + \alpha'_{31}/2 \geq \alpha_{31} + 1$, характерен для целочисленных значений функций (5.25) и в тех случаях, когда

$$a_{31} = c_{31} + \alpha'_{31}, \quad c_{31} \geq 0,$$

поскольку делители $\mu_{31}^{c_{31}+\alpha_{31}+(\alpha'_{31}+1)/2}$ при нечетном α'_{31} и $\mu_{31}^{c_{31}+\alpha_{31}+\alpha'_{31}/2}$ при четном α'_{31} имеются как у целочисленных значений функции $|k|\beta c$ (см. формулы (П6.3), (П6.4б)), так и у значений переменной $n''_{13} = \mu_{31}^{c_{31}+\alpha'_{31}}N_{31}$.

Следовательно, координата (П4.10) не может принимать целочисленных значений, если $a_{31} = c_{31} + \alpha'_{31}, \quad c_{31} \geq 0$.

Пусть

$$\alpha'_{31}/2 - \alpha_{31} \leq a_{31} \leq c_{31} + \alpha'_{31} - 1, \quad c_{31} \geq 0.$$

Тогда целочисленные значения у функции (П6.3) можно ожидать только при четном значении α'_{31}, поскольку μ_{31} и R_- (см. формулу (П6.4а)) – взаимно простые. Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = \mu_{31}^{a_{31}-\alpha'_{31}/2} 2^{\beta-\delta} Q_{31}\zeta''_1, \quad \zeta_2 = \mu_{31}^{a_{31}-\alpha'_{31}/2} 2^{\beta-\delta} Q_{31}\zeta''_2, \tag{П6.7а}$$

$$\zeta_3 = 0, \tag{П6.7б}$$

где

$$\zeta''_1 = 2^{\alpha}\mu_{31}^{\alpha'_{31}/2-\alpha_{31}} n'_{13} N_{31} m_{21} + s\eta m_{22} R_- ; \tag{П6.8а}$$

$$\zeta''_2 = 2^{\alpha}\mu_{31}^{\alpha'_{31}/2-\alpha_{31}} n'_{13} N_{31} m_{22} - s\eta m_{21} R_- ; \tag{П6.8б}$$

Q_{31} и R_- определяются формулами (П6.6), (П6.4а); $\alpha'_{31}/2 - \alpha_{31} \ge 1$.

Значения функций (П6.7) могут быть целочисленными, если

$$\alpha'_{31}/2 \le a_{31} \le c_{31} + \alpha'_{31} - 1 ,$$

но эти значения имеют общий делитель

$$d = \mu_{31}^{a_{31}-\alpha'_{31}/2} , \tag{П6.9}$$

где $a_{31} - \alpha'_{31}/2 \ge 0$.

Координата $n'_1 = 2^{\beta-\nu}\eta_k\mu_1\mu_2(\mu_3/\mu_{31}^{\alpha_{31}})\mu_{31}^{\alpha_{31}}/d$ (см. первую из формул (5.27) и формулу (4.43а)) при таком d может принимать целочисленные значения, если

$$\alpha'_{31}/2 \le a_{31} \le \alpha'_{31}/2 + \alpha_{31} . \tag{П6.10а}$$

Тогда целочисленные значения функции (5.23) можно ожидать, если

$$b_{31} \ge \alpha'_{31}/2 , \tag{П6.10б}$$

иначе не сократим множитель $\mu_{31}^{\alpha'_{31}}$ в знаменателе формулы (5.23).

Перейдем к переменным

$$a'_{31} = a_{31} - \alpha'_{31}/2, \quad b'_{31} = b_{31} - \alpha'_{31}/2, \tag{П6.11}$$

где

$$0 \le a'_{31} \le \alpha_{31}, \quad b'_{31} \ge 0,$$

в силу неравенств (П6.10), и выразим функцию (5.29) и координату n'_2 (см. вторую из формул (5.27)) через эти переменные в виде

$$N' = \begin{cases} \mu_{31}^{a'_{31}+\alpha'_{31}/2} N'_-, & \text{если } a'_{31} \le b'_{31} - 1, \\ \mu_{31}^{a'_{31}+\alpha'_{31}/2} N'_0, & \text{если } a'_{31} = b'_{31}, \\ \mu_{31}^{b'_{31}+\alpha'_{31}/2} N'_+, & \text{если } a'_{31} \ge b'_{31} + 1, \end{cases}$$

где

$$N'_- = 2^{\alpha} n'_{13} N_{31} - \mu_{31}^{b'_{31}-a'_{31}} 2^{\sigma}\eta_k\eta_g n'_g G_{31} ; \tag{П6.12а}$$

$$N_0' = 2^{\alpha} n_{13}' N_{31} - 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n_g' G_{31} \; ; \qquad (П6.12б)$$

$$N_+' = \mu_{31}^{a_{31}'-b_{31}'} 2^{\alpha} n_{13}' N_{31} - 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n_g' G_{31} \; ; \qquad (П6.12в)$$

$$n_2' = 2^{\beta-\lambda} |U_{31}'| \mu_{31}^{\alpha_{31}-\alpha_{31}'} N' / d \; . \qquad (П6.13)$$

Здесь

$$U_{31}' = \mu_{31}^{\alpha_{31}'-\alpha_{31}} U' \; , \qquad (П6.14)$$

U' определяется формулой (5.30), $d = \mu_{31}^{a_{31}'}$ (см. формулы (П6.9), (П6.11)).

Заметим, однако, что при $a_{31}' \geq b_{31}' + 1$ и $a_{31}' \leq b_{31}' - 1$ значения координаты (П6.13) целочисленными быть не могут. Действительно, $n_2' = 2^{\beta-\lambda} |U_{31}'| N_+' / \mu_{31}^{a_{31}'-b_{31}'+\alpha_{31}'/2-\alpha_{31}}$ при $a_{31}' \geq b_{31}' + 1$. Множитель $\mu_{31}^{a_{31}'-b_{31}'+\alpha_{31}'/2-\alpha_{31}}$ в знаменателе этой формулы не меньше, чем μ_{31}^2, поскольку $\alpha_{31}'/2 - \alpha_{31} \geq 1$ при четном α_{31}' (см. (П6.1)), и не сократим, так как μ_{31} и N_+' (см. (П6.12в)) – взаимно простые. Так же обстоит дело при $a_{31}' \leq b_{31}' - 1$: множитель $\mu_{31}^{\alpha_{31}'/2-\alpha_{31}} \geq \mu_{31}$ в знаменателе формулы

$$n_2' = 2^{\beta-\lambda} |U_{31}'| N_-' / \mu_{31}^{\alpha_{31}'/2-\alpha_{31}}$$

не сократим, поскольку μ_{31} и N_-' (см. (П6.12а)) – взаимно простые.

Пусть $a_{31}' = b_{31}'$.

Тогда μ_{31} и N_0' (см. (П6.12б)) взаимно простыми могут и не быть. Учитывая это, предположим, что

$$N_0' = \mu_{31}^{r_{31}} N_{00}',$$

где r_{31} – неотрицательное целое число; N_{00}' – натуральное число, взаимно простое с μ_{31}.

Тогда координаты (5.27) и функции (5.22) будут выражаться формулами:

$$n_1' = 2^{\beta-\nu} \eta_k \mu_1 \mu_2 (\mu_3 / \mu_{31}^{\alpha_{31}}) \mu_{31}^{\alpha_{31}} / \mu_{31}^{a_{31}'} \; , \qquad (П6.15а)$$

$$n_2' = 2^{\beta-\nu-\lambda} |U_{31}'| \mu_{31}^{r_{31}'} N_{00}' \; , \qquad (П6.15б)$$

где U_{31}' определяется формулой (П6.14);

$$r_{31}' = r_{31} - \alpha_{31}'/2 + \alpha_{31} \; ;$$

$$\tilde{\xi}_{11} = \tilde{\xi}_{11}' / \mu_{31}^{\alpha_{31}-a_{31}'}, \; \tilde{\xi}_{12} = \tilde{\xi}_{12}' / \mu_{31}^{\alpha_{31}-a_{31}'},; \qquad (П6.16а)$$

$$\tilde{\xi}_{13} = \mu_{31}^{a_{31}'+r_{31}'} 2^{\beta-\lambda} U_{31}' N_{00}',. \qquad (П6.16б)$$

Здесь

$$\tilde{\xi}_{11} = \frac{\eta_k [2^{\beta-\delta} Q_{31} \zeta_1'' - \mu_{31}^{r_{31}'} 2^{\beta-\lambda} m_{21} |U_{31}'| N_{00}']}{2^{\beta} \mu_1 \mu_2 (\mu_3 / \mu_{31}^{\alpha_{31}})} ; \qquad (\text{П6.17а})$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \frac{\eta_k [2^{\beta-\delta} Q_{31} \zeta_2'' - \mu_{31}^{r_{31}'} 2^{\beta-\lambda} m_{22} |U_{31}'| N_{00}']}{2^{\beta} \mu_1 \mu_2 (\mu_3 / \mu_{31}^{\alpha_{31}})} , \qquad (\text{П6.17б})$$

где ζ_1'', ζ_2'' определяются формулами (П6.8).

Координаты (П6.15) и функции (П6.16) могут принимать целочисленные значения, не имеющие общего делителя, равного μ_{31}, при $a_{31}' = \alpha_{31}$, $r_{31}' \geq 0$, а также при $0 \leq a_{31}' \leq \alpha_{31} - 1$, $r_{31}' = 0$, если целочисленные значения функций (П6.17) имеют наибольший общий делитель $\mu_{31}^{\alpha_{31} - a_{31}'}$.

Итак, если в разложениях (4.43) имеется отличный от единицы множитель μ_{31}, входящий в (4.43б) в степени α_{31}', равной четному натуральному числу, удовлетворяющему неравенству $\alpha_{31}' \geq 2(\alpha_{31} + 1)$, то значения переменных n_{13}'', n_g'', параметра k'' в (5.19) – (5.21), подходящие с точки зрения требований, которые предъявляются к целочисленным значениям функций (5.22) – (5.26), (5.29) и координат (5.27), есть значения функций

$$n_{13}'' = \mu_{31}^{\alpha_{31}'/2 + a_{31}'} N_{31} , \quad n_g'' = \mu_{31}^{\alpha_{31}'/2 + a_{31}'} G_{31} , \quad k'' = \mu_{31}^{c_{31}} K_{31} , \qquad (\text{П6.18})$$

где N_{31}, G_{31}, K_{31} определяются формулами (П6.2);

$$c_{31} \geq 0 ; \qquad (\text{П6.19})$$

показатели степени a_{31}', b_{31}' принимают значения

$$a_{31}' = \alpha_{31}, \ b_{31}' = \alpha_{31} , \qquad (\text{П6.20а})$$

если целочисленные значения функции (5.29) имеют делитель $\mu_{31}^{r_{31}' + \alpha_{31}'}$, где $r_{31}' \geq 0$, и значения, принадлежащие интервалу

$$0 \leq a_{31}' \leq \alpha_{31} - 1, \ b_{31}' = a_{31}', \qquad (\text{П6.20б})$$

если целочисленные значения функции (5.29) имеют делитель $\mu_{31}^{a_{31}' + \alpha_{31}' - \alpha_{31}}$, а целочисленные значения функций (5.22а), (5.22б) – наибольший общий делитель $\mu_{31}^{\alpha_{31} - a_{31}}$.

Зависимость переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от множителей, входящих в разложение μ_1 на простые множители

Предположим, что в произведении (4.37а) множитель μ_{11} отличен от единицы, переменные n'_{13}, n'_g, параметр k' и μ_{11} – взаимно простые, а

$$n''_{13} = \mu_{11}^{a_{11}} N_{11}\ , \quad n''_g = \mu_{11}^{b_{11}} G_{11}\ , \quad k'' = \mu_{11}^{c_{11}} K_{11}\ , \tag{П7.1}$$

где a_{11}, c_{11}, b_{11} – неотрицательные целые числа;

$$N_{11} = M_1^{\lambda_1/2} \mu_{31}^{(\alpha'_{31}/2)+a'_{31}} N\,,\ \ G_{11} = M_1^{\lambda_1/2} \mu_{31}^{(\alpha'_{31}/2)+a'_{31}} G\,,\ K_{11} = M_1^{c_1} \mu_{31}^{c_{31}} K\ ;$$

N, K, G – нечетные натуральные числа, взаимно простые с M_1, μ_{31}, μ_{11}; значения показателей степени c_{31}, a'_{31}, c_1 определяются выше (см. (П6.19), (П6.20) и пояснения к формулам (П5.9)).

Функция (5.24) выражается через переменные a_{11}, c_{11} формулой

$$|k|\beta c = \begin{cases} \mu_{11}^{a_{11}} R_-, & \text{если } c_{11} + \alpha'_{11} - a_{11} \geq 1, \\ \mu_{11}^{c_{11}+\alpha'_{11}} R, & \text{если } a_{11} = c_{11} + \alpha'_{11}, \\ \mu_{11}^{(a_{11}+c_{11}+\alpha'_{11})/2} R_+, & \text{если } a_{11} \geq c_{11} + \alpha'_{11} + 1, \end{cases} \tag{П7.2}$$

где

$$R_- = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{11} (A_{11} + \mu_{11}^{c_{11}+\alpha'_{11}-a_{11}} B_{11})}\ ; \tag{П7.3а}$$

$$R = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{11} (A_{11} + B_{11})}\ ; \tag{П7.3б}$$

$$R_+ = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{11} (\mu_{11}^{a_{11}-c_{11}-\alpha'_{11}} A_{11} + B_{11})}\ ; \tag{П7.3в}$$

$A_{11} = 2^\alpha A n'_{13} N_{11}$; $B_{11} = 2^{\delta+r} k' K_{11} B / \mu_{11}^{\alpha'_{11}}$; A, B определяются формулами (5.31а);

$$\alpha_{11} = 1, 2, \ldots,\quad 0 \leq \alpha'_{11} \leq 2\alpha_{11} - 1 \tag{П7.4}$$

(см. формулы (4.37)); A_{11}, B_{11} и μ_{11} – взаимно простые.

Пусть

$$a_{11} \geq c_{11} + \alpha'_{11} + 1,$$

где $c_{11} \geq 0$. Тогда функция (П7.2) может принимать целочисленные значения, если

$$a_{11} \geq c_{11} + \alpha'_{11} + 2\ , \tag{П7.5}$$

где a_{11} – четное при четном $c_{11} + \alpha'_{11}$ и нечетное при нечетном $c_{11} + \alpha'_{11}$.

Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} dQ_{11}\zeta_1'' \ , \quad \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} dQ_{11}\zeta_2'' \ , \quad \zeta_3 = 0 \ , \tag{П7.6}$$

где

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha}\mu_{11}^{(a_{11}-c_{11}-\alpha_{11}')/2} n_{13}' N_{11} m_{21} + s\eta m_{22} R_+ \ ;$$

$$\zeta_2'' = 2^{\alpha}\mu_{11}^{(a_{11}-c_{11}-\alpha_{11}')/2} n_{13}' N_{11} m_{22} - s\eta m_{21} R_+ \ ;$$

$$Q_{11} = \mu_{11}^{\alpha_{11}'-\alpha_{11}} Q \ ; \tag{П7.7}$$

Q и R_+ определяются формулами (5.31б), (П7.3в);

$$(a_{11} - c_{11} - \alpha_{11}')/2 \geq 1 \ ,$$

в силу неравенства (П7.5), т. е. ζ_1'', ζ_2'' и μ_{11} – взаимно простые.

Целочисленные значения функций (П7.6) имеют общий делитель

$$d = \mu_{11}^{\alpha_{11}+(a_{11}+c_{11}-\alpha_{11}')/2} \ ,$$

где

$$\alpha_{11} + (a_{11} + c_{11} - \alpha_{11}')/2 \geq \alpha_{11} + c_{11} + 1 \geq \alpha_{11} + 1 \ . \tag{П7.8}$$

Координата n_1' при таком d выражается формулой

$$n_1' = 2^{\beta-\nu}\eta_k(\mu_1 / \mu_{11}^{\alpha_{11}})\mu_2\mu_3 / \mu_{11}^{(a_{11}+c_{11}-\alpha_{11}')/2}$$

и целочисленных значений иметь не может, так как $(a_{11} + c_{11} - \alpha_{11}')/2 \geq 1$, в силу неравенств (П7.8).

Пусть

$$\alpha_{11} = c_{11} + \alpha_{11}' \ ,$$

где $c_{11} \geq 0$.

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} dQ_{11}\zeta_1'' \ , \quad \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} dQ_{11}\zeta_2'' \ , \quad \zeta_3 = 0 \ ,$$

где

$$d = \mu_{11}^{\alpha_{11}+c_{11}} \ ;$$

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha} n_{13}' N_{11} m_{21} + s\eta m_{22} R \ ; \quad \zeta_2'' = 2^{\alpha} n_{13}' N_{11} m_{22} - s\eta m_{21} R \ ;$$

Q_{11} и R определяются формулами (П7.7), (П7.3б);

$$n_1' = 2^{\beta-\nu}\eta_k(\mu_1 / \mu_{11}^{\alpha_{11}})\mu_2\mu_3 / \mu^{c_{11}} \ ; \tag{П7.9}$$

$$\tilde{\xi}_{11} = \frac{\eta_k}{2^{\beta}(\mu_1 / \mu_{11}^{\alpha_{11}})\mu_2\mu_3}(\mu_{11}^{c_{11}} 2^{\beta-\delta} Q_{11}\zeta_1'' - 2^{\beta-\lambda} m_{21} \mid U_{11}' \mid \tilde{\xi}_{13}'') \ ;$$

(П7.10а)

$$\tilde{\xi}_{12} = \frac{\eta_k}{2^{\beta}(\mu_1 / \mu_{11}^{\alpha_{11}})\mu_2\mu_3}(\mu_{11}^{c_{11}} 2^{\beta-\delta} Q_{11}\zeta_2'' - 2^{\beta-\lambda} m_{22} \mid U_{11}' \mid \tilde{\xi}_{13}'');$$

П7.10б)

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\beta-\lambda} U_{11}'\mu_{11}^{\alpha_{11}}\tilde{\xi}_{13}'' \ ;$$

$$U'_{11} = \mu_{11}^{\alpha'_{11}-\alpha_{11}} U' \;; \tag{П7.11}$$

$$\tilde{\xi}''_{13} = \mu_{11}^{c_{11}} 2^{\alpha} n'_{13} N_{11} - \mu_{11}^{b_{11}-\alpha'_{11}} 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n'_g G_{11} \;; \tag{П7.12}$$

U' определяется формулой (5.30).

Легко видеть, что координата (П7.9) и функции (П7.12), (П7.10) могут принимать целочисленные значения, если

$$a_{11} = \alpha'_{11}\,, \;\; b_{11} \ge a_{11}\,, \;\; c_{11} = 0\,. \tag{П7.13}$$

Пусть $c_{11} + \alpha'_{11} - a_{11} \ge 1$.

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} Q_{11} \mu_{11}^{a_{11}+\alpha_{11}} \zeta''_1 / \mu_{11}^{\alpha'_{11}}\,, \tag{П7.14а}$$

$$\zeta_2 = 2^{\beta-\delta} Q_{11} \mu_{11}^{a_{11}+\alpha_{11}} \zeta''_2 / \mu_{11}^{\alpha'_{11}}\,, \tag{П7.14б}$$

$$\zeta_3 = 0\,. \tag{П7.14в}$$

Здесь

$$\zeta''_1 = 2^{\alpha} n'_{13} N_{11} m_{21} + s\eta m_{22} R_-\,; \quad \zeta''_2 = 2^{\alpha} n'_{13} N_{11} m_{22} - s\eta m_{21} R_-\,, \tag{П7.15}$$

где Q_{11} и R_- определяются формулами (П7.7), (П7.3а); ζ''_1, ζ''_2 и μ_{11} взаимно простыми могут и не быть.

Предположим, что целочисленные значения функций (П7.15) имеют наибольший общий делитель, равный $\mu_{11}^{s_{11}}$, и выразим их в виде

$$\zeta''_1 = \mu_{11}^{s_{11}} C_1\,, \; \zeta''_2 = \mu_{11}^{s_{11}} C_2\,. \tag{П7.16}$$

где s_{11} – неотрицательное целое число.

Функции (П7.14) при таких ζ''_1, ζ''_2 выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} Q_{11} \mu_{11}^{a_{11}+s_{11}+\alpha_{11}-\alpha'_{11}} C_1\,, \tag{П7.17а}$$

$$\zeta_2 = 2^{\beta-\delta} Q_{11} \mu_{11}^{a_{11}+s_{11}+\alpha_{11}-\alpha'_{11}} C_2\,, \tag{П7.17б}$$

и могут принимать целочисленные значения, если справедливы либо равенство

$$a_{11} + s_{11} = \alpha'_{11} - \alpha_{11}\,, \tag{П7.18а}$$

либо неравенство

$$a_{11} + s_{11} + \alpha_{11} - \alpha'_{11} \ge 1\,. \tag{П7.18б}$$

Первое из условий (П7.18) выполнимо, если

$$\begin{gathered} \alpha_{11} \le \alpha'_{11} \le 2\alpha_{11} - 1\,, \\ 0 \le a_{11} \le \alpha'_{11} - \alpha_{11}\,, \quad s_{11} = \alpha'_{11} - \alpha_{11} - a_{11}. \end{gathered} \tag{П7.19}$$

Координаты (5.27) при таких $\alpha'_{11}, a_{11}, s_{11}$ выражаются формулами:

$$n'_1 = 2^{\beta-\nu} \eta_k (\mu_1 / \mu_{11}^{\alpha_{11}}) \mu_2 \mu_3 \mu_{11}^{\alpha_{11}}\,, \;\; n'_2 = 2^{\beta-\nu-\lambda} \,|\, U'_{11} \,|\, N' / \mu_{11}^{\alpha'_{11}-\alpha_{11}}\,,$$

где U'_{11} и N' определяются формулами (П7.11), (5.29) и могут принимать целочисленные значения, не имеющие общего делителя, равного μ_{11}, в следующих случаях.

Во-первых, при

$$a_{11} = \alpha'_{11} - \alpha_{11}, \; b_{11} \geq \alpha'_{11} - \alpha_{11} + 1, \; s_{11} = 0,$$

когда

$$N' = \mu_{11}^{\alpha'_{11}-\alpha_{11}} N'_{-},$$

где

$$N'_{-} = 2^{\alpha} n'_{13} N_{11} - 2^{\delta} \mu_{11}^{b_{11}-(\alpha'_{11}-\alpha_{11})} \eta_k \eta_g \eta'_g G_{11}.$$

Во-вторых, при

$$0 \leq a_{11} \leq \alpha'_{11} - \alpha_{11}, \; b_{11} = a_{11}, \; s_{11} = \alpha'_{11} - \alpha_{11} - a_{11}, \qquad (\text{П7.20})$$

когда

$$N' = \mu_{11}^{a_{11}+r_{11}} N'_0,$$

$$a_{11} + r_{11} = \alpha'_{11} - \alpha_{11}$$

и функция

$$N'_0 = (2^{\alpha} n'_{13} N_{11} - 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n'_g G_{11}) / \mu_{11}^{r_{11}} \qquad (\text{П7.21})$$

при $r_{11} = s_{11} = \alpha'_{11} - \alpha_{11} - a_{11}$ принимает целочисленные значения, взаимно простые с μ_{11}.

Однако в первом случае целочисленных значений не имеет функция (5.23), так как множитель $\mu_{11}^{\alpha'_{11}}$ в знаменателе выражения

$$\tilde{\xi}'_1 = \tilde{\xi}''_1 / \mu_{11}^{\alpha'_{11}}, \qquad (\text{П7.22})$$

где

$$\tilde{\xi}''_1 = \mu_{11}^{2a_{11}} 2^{2\alpha} n'^2_{13} N^2_{11} + \mu_{11}^{2b_{11}} 2^{2\sigma} n'^2_g G^2_{11}$$

и

$$\tilde{\xi}''_1 \Big|_{a_{11}=\alpha'_{11}-\alpha_{11}, \; b_{11} \geq \alpha'_{11}-\alpha_{11}+1} =$$

$$= \mu_{11}^{2(\alpha'_{11}-\alpha_{11})} \left\{ 2^{2\alpha} n'^2_{13} N^2_{11} + \mu_{11}^{2[b_{11}-(\alpha'_{11}-\alpha_{11})]} 2^{2\sigma} n'^2_g G^2_{11} \right\},$$

не сократим в силу неравенств (П7.4).

Во втором случае дело обстоит аналогичным образом, если $r_{11} = s_{11} \neq 0$, так как

$$\tilde{\xi}''_1 \Big|_{a_{11}=b_{11}} = \mu_{11}^{2a_{11}} \tilde{\xi}''_0,$$

где $2a_{11} < \alpha'_{11}$ в силу неравенств $0 \leq 2a_{11} \leq \alpha'_{11} - (2\alpha_{11} - \alpha'_{11})$, $2\alpha_{11} - \alpha'_{11} \geq 1$, следующих из неравенств (П7.20), (П7.19), а

$$\tilde{\xi}''_0 = 2^{2\alpha} n'^2_{13} N^2_{11} + 2^{2\sigma} n'^2_g G^2_{11} \qquad (\text{П7.23})$$

и μ_{11} – взаимно простые при целочисленном N'_0 (см.(П7.21)) и $r_{11}=s_{11}\neq 0$. В справедливости последнего утверждения нетрудно убедится, замечая, то сумма (П7.23) при целочисленном N'_0 выражается формулой

$$\tilde{\xi}''_0=\mu_{11}^{r_{11}}N'_0(\mu_{11}^{r_{11}}N'_0+2^{\sigma+1}\eta_k\eta_g n'_g G_{11})+2^{2\sigma+1}n'^2_g G^2_{11}\,, \qquad (\text{П}7.24)$$

если $2^\alpha n'_{13}N_{11}$ в (П7.23) исключить с помощью (П7.21), где $2^{2\sigma+1}n'^2_g G^2_{11}$ и μ_{11} – взаимно простые. Следовательно, целочисленных значений выражения (П7.22) во втором случае можно ожидать только при

$$a_{11}=b_{11}=\alpha'_{11}-\alpha_{11}\,,\ c_{11}\geq 0\,, \qquad (\text{П}7.25)$$

если целочисленные значения (П7.16) функций ζ''_1, ζ''_2 (а стало быть, и функций (5.25)) не имеют $(s_{11}=0)$ общего делителя, равного μ_{11}.

Предположим, что выполняется второе из условий (П7.18).Тогда целочисленные значения функций (П7.17) имеют общий делитель

$$d=\mu_{11}^{a_{11}+s_{11}+\alpha_{11}-\alpha'_{11}}\,.$$

Координаты (5.27) при таком d выражается формулами:

$$n'_1=2^{\beta-\nu}\eta_k(\mu_1/\mu_{11}^{\alpha_{11}})\mu_2\mu_3\mu_{11}^{\alpha_{11}}/\mu_{11}^{a_{11}+s_{11}}\,, \qquad (\text{П}7.26)$$

$$n'_2=2^{\beta-\lambda-\nu}\left|U'_{11}\right|N'/\mu_{11}^{a_{11}+s_{11}}\,,$$

где U'_{11} определяется формулой (П7.11);

$$N'=\begin{cases}\mu_{11}^{a_{11}}N'_-\,,\ \text{если}\ \ b_{11}\geq a_{11}+1,\\ \mu_{11}^{a_{11}}N'_{00}\,,\ \text{если}\ \ a_{11}=b_{11},\\ \mu_{11}^{b_{11}}N'_+\,,\ \text{если}\ \ a_{11}\geq b_{11}+1;\end{cases} \qquad (\text{П}7.27)$$

$$N'_-=2^\alpha n'_{13}N_{11}-2^\sigma\mu_{11}^{b_{11}-a_{11}}\eta_k\eta_g n'_g G_{11}\,;$$

$$N'_{00}=2^\alpha n'_{13}N_{11}-2^\sigma\eta_k\eta_g n'_g G_{11}\,; \qquad (\text{П}7.28)$$

$$N'_+=2^\alpha\mu_{11}^{a_{11}-b_{11}}n'_{13}N_{11}-2^\sigma\eta_k\eta_g n'_g G_{11}\,.$$

Однако при $a_{11}\geq b_{11}+1$ координата $n'_2=2^{\beta-\lambda-\nu}\left|U'_{11}\right|N'_+/\mu_{11}^{a_{11}-b_{11}+s_{11}}$ целочисленных значений иметь не может, поскольку N'_+ и μ_{11} – взаимно простые, а $a_{11}-b_{11}\geq 1$.

При $b_{11}\geq a_{11}+1$ координата $n'_2=2^{\beta-\lambda-\nu}\left|U'_{11}\right|N'_-/\mu_{11}^{s_{11}}$ и координата (П7.26) могут принимать целочисленные значения, если

$$s_{11}=0\ ,\ \ a_{11}\leq\alpha'_{11}\,,$$

поскольку N'_- и μ_{11} – взаимно простые, а множитель $\mu_{11}^{\alpha'_{11}}$ в знаменателе выражения (П7.22), входящего в (5.23), сократим при таких a_{11}, b_{11}, если

$2a_{11} \geq \alpha'_{11}$. Стало быть, значения показателей a_{11}, b_{11}, c_{11}, удовлетворяющие неравенствам

$$a_{11}^{\min} \leq a_{11} \leq \alpha'_{11}\,, \quad b_{11} \geq a_{11} + 1, \quad c_{11} + \alpha'_{11} - a_{11} \geq 1\,, \qquad (\text{П}7.29)$$

$$c_{11} \geq 0 \qquad (\text{П}7.30\text{а})$$

при $a_{11} \leq \alpha'_{11} - 1$ и

$$c_{11} \geq 1 \qquad (\text{П}7.30\text{б})$$

при $a_{11} = \alpha'_{11}$, где

$$a_{11}^{\min} = \begin{cases} \alpha'_{11}/2 \ \text{при четном} \ \alpha'_{11}\,, \\ (\alpha'_{11} + 1)/2 \ \text{при нечетном} \ \alpha'_{11}\,, \end{cases} \qquad (\text{П}7.31)$$

следует считать выделенными, если целочисленные значения (П7.16) функций (П7.15) не имеют $(s_{11} = 0)$ общего делителя, равного μ_{11}, а целочисленные значения функций (5.25) имеют наибольший общий делитель, равный $\mu_{11}^{a_{11}+\alpha_{11}-\alpha'}$.

Пусть $a_{11} = b_{11}$. Тогда

$$n'_2 = 2^{\beta-\lambda-\nu} \left|U'_{11}\right| N'_{00} / \mu_{11}^{s_{11}}\,, \qquad (\text{П}7.32)$$

где N'_{00} определяется формулой (П7.28).

Множитель $\mu_{11}^{s_{11}}$ в знаменателе формулы (П7.32) сократим, если

$$N'_{00} = \mu_{11}^{r_{11}} N'_0\,, \qquad (\text{П}7.33)$$

где $r_{11} \geq s_{11}$, r_{11} – неотрицательное целое число, N'_0 – натуральное число, взаимно простое с μ_{11}. Полагая это условие выполненным, будем иметь:

$$\tilde{\xi}_{11} = \frac{\eta_k \mu_{11}^{a_{11}+s_{11}+\alpha_{11}-\alpha'_{11}} \tilde{\xi}'_{11}}{2^{\beta} (\mu_1 / \mu_{11}^{\alpha_{11}}) \mu_2 \mu_3 \mu_{11}^{\alpha_{11}}}\,, \qquad (\text{П}7.34\text{а})$$

$$\tilde{\xi}_{12} = \frac{\eta_k \mu_{11}^{a_{11}+s_{11}+\alpha_{11}-\alpha'_{11}} \tilde{\xi}'_{12}}{2^{\beta} (\mu_1 / \mu_{11}^{\alpha_{11}}) \mu_2 \mu_3 \mu_{11}^{\alpha_{11}}}\,, \qquad (\text{П}7.34\text{б})$$

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\beta-\lambda} \mu_{11}^{a_{11}+s_{11}+\alpha_{11}-\alpha'_{11}+(r_{11}-s_{11})} U'_{11} N'_0\,, \qquad (\text{П}7.34\text{в})$$

где U'_{11} определяется формулой (П7.11);

$$\tilde{\xi}'_{11} = 2^{\beta-\delta} Q_{11} C_1 - \mu_{11}^{r_{11}-s_{11}} 2^{\beta-\lambda} m_{21} \left|U'_{11}\right| N'_0\,; \qquad (\text{П}7.35\text{а})$$

$$\tilde{\xi}'_{12} = 2^{\beta-\delta} Q_{11} C_2 - \mu_{11}^{r_{11}-s_{11}} 2^{\beta-\lambda} m_{22} \left|U'_{11}\right| N'_0\,. \qquad (\text{П}7.35\text{б})$$

Здесь C_1 и C_2 определяются выше (см. пояснения к формулам (П7.16));

$$\tilde{\xi}'_1 = \mu_{11}^{2a_{11}} \tilde{\xi}''_0 / \mu_{11}^{\alpha'_{11}}\,, \qquad (\text{П}7.36)$$

где $\tilde{\xi}''_0$ определяется формулой (П7.24).

Целочисленные значения функций (П7.34), координаты

$$n_2' = 2^{\beta-\lambda-\nu}|U_{11}'|\mu_{11}^{r_{11}} N_0' / \mu_{11}^{s_{11}}$$

и координаты (П7.26), не имеющие общего делителя, равного μ_{11}, можно ожидать при $r_{11} > s_{11}$, если $a_{11} + s_{11} = \alpha_{11}'$ (или $0 \le a_{11} \le \alpha_{11}'$, $s_{11} = \alpha_{11}' - a_{11}$), поскольку такой делитель не имеют целочисленные значения функций (П7.35), а также при $r_{11} = s_{11}$, если $a_{11} + s_{11} \le \alpha_{11}'$ (или $0 \le a_{11} \le \alpha_{11}'$, $0 \le s_{11} \le \alpha_{11}' - a_{11}$) и целочисленные значения функций (П7.35) имеют наибольший общий делитель, равный $\mu_{11}^{\alpha_{11}'-(a_{11}+s_{11})}$. Что же касается функции (П7.36), то она может принимать целочисленные значения при $r_{11} > s_{11}$ и $r_{11} = s_{11} \ge 0$, если $2a_{11} \ge \alpha_{11}'$.

При $r_{11} = s_{11} = 0$ допустимы также значения a_{11}, отвечающие условиям:

$$a_{11} + \alpha_{11} - \alpha_{11}' \ge 1 \tag{П7.37а}$$

(см. (П7.18б)) и

$$0 \le 2a_{11} \le \alpha_{11}' - 1 \ , \tag{П7.37б}$$

если показатель степени α_{11}' удовлетворяет неравенствам

$$1 \le \alpha_{11}' \le 2\alpha_{11} - 1$$

и целочисленные значения функции

$$\tilde{\xi}_0''\big|_{r_{11}=0} = N_0'(N_0' + 2^{\sigma+1}\eta_k\eta_g n_g' G_{11}) + 2^{2\sigma+1} n_{11}'^2 G_{11}^2 \tag{П7.38}$$

(см. формулу (П7.24)) имеют делитель $\mu_{11}^{\alpha_{11}'-2a_{11}}$. Стало быть, при

$$b_{11} = a_{11} \ , \tag{П7.39а}$$

$$c_{11} + \alpha_{11}' - a_{11} \ge 1 \tag{П7.39б}$$

можно выделить:

1) значения a_{11}, принадлежащие интервалу

$$a_{11}^{\min} \le a_{11} \le \alpha_{11}' \ , \tag{П7.40}$$

где $a_{11}^{\min}$ определяется формулами (П7.31), если целочисленные значения (П7.16) функций (П7.15) имеют наибольший общий делитель $\mu_{11}^{\alpha_{11}'-a_{11}}$, целочисленные значения функций (5.25) – наибольший общий делитель $\mu_{11}^{\alpha_{11}}$, а целочисленные значения функций (5.29) – наибольший общий делитель $\mu_{11}^{a_{11}+r_{11}}$, где $a_{11} + r_{11} > \alpha_{11}'$, (см. формулы (П7.27), (П7.28), (П7.33));

2) значения a_{11}, принадлежащие тому же интервалу (П7.40), если целочисленные значения (П7.16) функций (П7.15) имеют наибольший общий делитель $\mu_{11}^{s_{11}}$, целочисленные значения функций (5.25) – наибольший об-

щий делитель $\mu_{11}^{a_{11}+s_{11}+\alpha_{11}-\alpha'_{11}}$, а целочисленные значения функций (5.29) – наибольший общий делитель $\mu_{11}^{a_{11}+s_{11}}$, где $0 \le s_{11} \le \alpha'_{11} - a_{11}$;

3) значения a_{11}, принадлежащие интервалу

$$0 \le a_{11} \le a_{11}^{\min} - 1 , \tag{П7.41}$$

если

$$\alpha_{11} \ge 2 ,\ 1 \le \alpha'_{11} \le \alpha_{11} - 1 ,$$

и интервалу

$$1 + \alpha'_{11} - \alpha_{11} \le a_{11} \le a_{11}^{\min} - 1 , \tag{П7.42}$$

если

$$\alpha_{11} \ge 3 ,\ \alpha_{11} \le \alpha'_{11} \le 2(\alpha_{11} - 2)$$

при четном α'_{11} и

$$\alpha_{11} \ge 2 ,\ \alpha_{11} \le \alpha'_{11} \le 2(\alpha_{11} - 3)$$

при нечетном α'_{11} (см. условия (П7.37)); в обоих случаях необходимо существование делителя $\mu_{11}^{\alpha'_{11}-2a_{11}}$ у целочисленных значений функций (П7.38).Значения показателя степени c_{11}, отвечающие условию (П7.39б), определяются неравенствами (П7.30) в зависимости от соотношений между a_{11} и α'_{11}.

Подводя итог, отметим, что ограничения (П7.13), (П7.25),(П7.29), (П7.30), (П7.39) – (П7.42), рассматриваемые совместно и выделяющие подходящие значения показателей степени a_{11}, b_{11}, c_{11} в формулах (П7.1), выражающих зависимость переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от μ_{11}, можно представить в виде:

$$a_{11}^{\min} \le a_{11} \le \alpha'_{11} ,\ b_{11} \ge a_{11} + 1 ,\ c_{11} \ge 0 \tag{П7.43а}$$

при $0 \le \alpha'_{11} \le 2\alpha_{11} - 1$; $\alpha_{11} \ge 1$;

$$0 \le a_{11} \le \alpha'_{11} ,\ b_{11} = a_{11} ,\ c_{11} \ge 0 \tag{П7.43б}$$

при $1 \le \alpha'_{11} \le \alpha_{11} - 1$; $\alpha_{11} \ge 2$;

$$\alpha'_{11} - \alpha_{11} \le a_{11} \le \alpha'_{11} ,\ b_{11} = a_{11} ,\ c_{11} \ge 0 \tag{П7.43в}$$

при $\alpha_{11} \le \alpha'_{11} \le 2\alpha_{11} - 1$, где $a_{11}^{\min}$ определяется формулами (П7.31), если не принимать во внимания детали, связанные с учетом свойств делимости целочисленных значений функций (5.22), (5.25), (5.29), (П7.27) и координат (5.27) на μ_{11}. Свойства эти допускают непосредственную проверку в каждом конкретном случае путем прямых вычислений, поскольку значения показателей a_{11}, b_{11}, а также и показателя c_{11}, как будет показано, ограничены сверху.

Зависимость переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от множителей, входящих в разложение μ_2 на простые множители

Предположим, что в произведении (4.40а) множитель μ_{21} отличается от единицы, переменные n'_{13}, n'_g, параметр k' и μ_{21} – взаимно простые, а

$$n''_{13} = \mu_{21}^{a_{21}} N_{21} , \tag{П8.1а}$$

$$n''_g = \mu_{21}^{b_{21}} G_{21} , \tag{П8.1б}$$

$$k'' = \mu_{21}^{c_{21}} K_{21} , \tag{П8.1в}$$

где a_{21}, b_{21}, c_{21} – неотрицательные целые числа;

$$\begin{aligned} N_{21} &= M_1^{\lambda_1/2} \mu_{11}^{a_{11}} \mu_{31}^{\alpha'_{31}/2+a'_{31}} N ; \\ G_{21} &= M_1^{\lambda_1/2} \mu_{11}^{b_{11}} \mu_{31}^{\alpha'_{31}/2+a'_{31}} G ; \\ K_{21} &= M_1^{c_1} \mu_{11}^{c_{11}} \mu_{31}^{c_{31}} K ; \end{aligned} \tag{П8.2}$$

N, G, K – нечетные натуральные числа, взаимно простые с M_1, μ_{11}, μ_{31}, μ_{21}; c_1, c_{11}, $c_{31} \geq 0$, значения показателей степени a'_{31}, a_{11}, b_{11} определяются формулами (П6.20), (П7.43).

Покажем, что значения показателей степени a_{21}, b_{21} в (П8.1а), (П8.1б) не меньше, чем α_{21}. Для этого рассмотрим функцию (5.22в), выразив ее в виде

$$\tilde{\xi}_{13} = 2^{\beta-\lambda} U'_{21} N'' , \tag{П8.3}$$

где

$$U'_{21} = \mu_{21}^{\alpha_{21}} U' ; \tag{П8.4}$$

U' определяется формулой (5.30);

$$N'' = \begin{cases} \mu_{21}^{a_{21}-\alpha_{21}} N'_- , & \text{если } b_{21} \geq a_{21}+1, \\ \mu_{21}^{a_{21}-\alpha_{21}} N'_0 , & \text{если } b_{21} = a_{21}, \\ \mu_{21}^{b_{21}-\alpha_{21}} N'_+ , & \text{если } b_{21} \leq a_{21}-1. \end{cases} \tag{П8.5}$$

Здесь

$$N'_- = 2^{\alpha} n'_{13} N_{21} - \mu_{21}^{b_{21}-a_{21}} 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n'_g G_{21} ; \tag{П8.6а}$$

$$N'_0 = 2^{\alpha} n'_{13} N_{21} - 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n'_g G_{21} ; \tag{П8.6б}$$

$$N'_+ = \mu_{21}^{a_{21}-b_{21}} 2^{\alpha} n'_{13} N_{21} - 2^{\sigma} \eta_k \eta_g n'_g G_{21} . \tag{П8.6в}$$

Функция (П8.5) может принимать целочисленные значения при

$$a_{21} \ge \alpha_{21}, \quad b_{21} \ge a_{21}, \tag{П8.7а}$$

$$\alpha_{21} \le b_{21} \le a_{21} - 1, \quad a_{21} \ge \alpha_{21} + 1, \tag{П8.7б}$$

поскольку N'_-, N'_+ и μ_{21} – взаимно простые, а также при

$$0 \le a_{21} \le \alpha_{21} - 1, \quad b_{21} = a_{21}, \tag{П8.7в}$$

если функция (П8.6б) имеет целочисленные значения вида

$$N'_0 = \mu_{21}^{r'_{21}} N'_{00}, \tag{П8.8а}$$

где N'_{00} – натуральное число; r'_{21} – неотрицательное целое число, удовлетворяющее неравенству

$$r'_{21} \ge \alpha_{21} - a_{21}. \tag{П8.8б}$$

Однако в последнем случае нет целочисленных значений у функции (5.23), поскольку несократим множитель $\mu_{21}^{2(\alpha_{21}-a_{21})}$ в знаменателе выражения $\tilde{\xi}'_1 = \tilde{\xi}'' / \mu_{21}^{2(\alpha_{21}-a_{21})}$, входящего в (5.23), где $\alpha_{21} - a_{21} \ge 1$ в силу (П8.7в), а $\tilde{\xi}'' = 2^{2\alpha} n_{13}'^2 N_{21}^2 + 2^{2\sigma} n_g'^2 G_{21}^2$ и μ_{21} – взаимно простые, в чем нетрудно убедиться, замечая, что при выполнении условий (П8.8) справедливо равенство

$$\tilde{\xi}'' = \mu_{21}^{r'_{21}} N'_{00} (\mu_{21}^{r'_{21}} N'_{00} + 2^{\sigma+1} \eta_k \eta_g n'_g G_{21}) + 2^{2\sigma+1} n_g'^2 G_{21}^2,$$

согласно которому $\tilde{\xi}''$ не имеет делителя, равного μ_{21}.

Таким образом, допустимые значения показателей степени a_{21}, b_{21}, должны удовлетворять ограничениям, которые устанавливаются формулами (П8.7а), (П8.7б). Учитывая это, от показателей степени a_{21}, b_{21} удобно перейти к показателям a'_{21}, b'_{21}, полагая

$$a_{21} = a'_{21} + \alpha_{21}, \quad b_{21} = b'_{21} + \alpha_{21}, \tag{П8.9}$$

где

$$a'_{21} \ge 0, \quad b'_{21} \ge 0. \tag{П8.10}$$

Рассмотрим функцию (5.24) и выразим ее через переменные a'_{21}, c_{21} в виде

$$|k|\beta c = \begin{cases} \mu_{21}^{a'_{21}+\alpha_{21}} R_-, & \text{если } a'_{21} \le c_{21} + \alpha_{21} + \gamma_{21} - 1, \\ \mu_{21}^{c_{21}+2\alpha_{21}+\gamma_{21}} R, & \text{если } a'_{21} = c_{21} + \gamma_{21} + 1, \\ \mu_{21}^{(a'_{21}+c_{21}+3\alpha_{21}+\gamma_{21})/2} R_+, & \text{если } a'_{21} \ge c_{21} + \alpha_{21} + \gamma_{21} + 1, \end{cases} \tag{П8.11}$$

где

$$R_- = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{21} (A_{21} + \mu_{21}^{c_{21}+\alpha_{21}+\gamma_{21}-a'_{21}} B_{21})}; \tag{П8.12а}$$

$$R = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{21} (A_{21} + B_{21})}; \tag{П8.12б}$$

$$R_+ = \sqrt{2^\alpha n'_{13} N_{21} (\mu_{21}^{a'_{21}-c_{21}-\alpha_{21}-\gamma_{21}} A_{21} + B_{21})}\ ; \qquad (\text{П8.12в})$$

$A_{21} = 2^\alpha A n'_{13} N_{21}$; $B_{21} = 2^{\delta+r} k' K_{21} B / \mu_{21}^{2\alpha_{21}+\gamma_{21}}$; A, B определяются формулами (5.31а);

$$\alpha_{21} = 1, 2 \ldots,\ \gamma_{21} = 0, 1, 2 \ldots \qquad (\text{П8.13})$$

(см. формулы (4.40а), (4.50а)); A_{21}, B_{21} и μ_{21} – взаимно простые.

Пусть

$$a'_{21} \ge c_{21} + \alpha_{21} + \gamma_{21} + 1\ , \qquad (\text{П8.14})$$

где $c_{21} \ge 0$.

Функция (П8.11) может принимать целочисленные значения при условии (П8.14), если

$$a'_{21} \ge c_{21} + \alpha_{21} + \gamma_{21} + 2\ , \qquad (\text{П8.15})$$

где a'_{21} – четное при четном $c_{21} + \alpha_{21} + \gamma_{21}$ и нечетное при нечетном $c_{21} + \alpha_{21} + \gamma_{21}$. Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} d Q_{21} \zeta''_1,\quad \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} d Q_{21} \zeta''_2,\quad \zeta_3 = 0\ , \qquad (\text{П8.16})$$

где

$$Q_{21} = \mu^{\alpha_{21}+\gamma_{21}} Q\ ; \qquad (\text{П8.17})$$

$$\zeta''_1 = 2^\alpha \mu_{21}^{(a'_{21}-c_{21}-\alpha_{21}-\gamma_{21})/2} n'_{13} N_{21} m_{21} + s\eta m_{22} R_+\ ;$$

$$\zeta''_2 = 2^\alpha \mu_{21}^{(a'_{21}-c_{21}-\alpha_{21}-\gamma_{21})/2} n'_{13} N_{21} m_{22} - s\eta m_{21} R_+\ .$$

Здесь Q определяется формулой (II8.31б); R_+ определяется формулой (П8.12в); ξ''_1, ξ''_2 и μ_{21} – взаимно простые, поскольку взаимно простые R_+ и μ_{21}, а $a'_{21} - c_{21} - \alpha_{21} - \gamma_{21} \ge 2$ (см. неравенство (П8.15)).

Целочисленные значения функций (П8.16) имеют общий делитель $d = \mu_{21}^{(a'_{21}+c_{21}+\alpha_{21}-\gamma_{21})/2}$, где $(a'_{21} + c_{21} + \alpha_{21} - \gamma_{21})/2 \ge c_{21} + \alpha_{21} + 1 \ge 1 + \alpha_{21}$ в силу неравенства (П8.15). Значения координаты n'_1 (см. первую из формул (5.27)) при таком d целочисленными быть не могут.

Пусть

$$a'_{21} = c_{21} + \alpha_{21} + \gamma_{21}\ . \qquad (\text{П8.18})$$

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} d Q_{21} \zeta''_1,\quad \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} d Q_{21} \zeta''_2,\quad \zeta_3 = 0\ , \qquad (\text{П8.19})$$

где Q_{21} определяется формулой (П8.17),

$$\zeta''_1 = 2^\alpha n'_{13} N_{21} m_{21} + s\eta m_{22} R,\quad \zeta''_2 = 2^\alpha n'_{13} N_{21} m_{22} - s\eta m_{21} R\ .$$

Здесь R определяется формулой (П8.12б)

Целочисленные значения функций (П8.19) имеют общий делитель

$$d = \mu_{21}^{c_{21}+\alpha_{21}}\ . \qquad (\text{П8.20})$$

Координата n_1' при таком d может принимать целочисленные значения, если $c_{21}=0$, $a_{21}'=\alpha_{21}+\gamma_{21}$, $b_{21}'\geq 0$ (см. неравенства (П8.10)). Однако множитель $\mu_{21}^{\alpha_{21}}$ в знаменателях формул (5.22а), (5.22б) сократим только при $b_{21}'\geq\alpha_{21}$ (см. формулы (П8.19), (П8.20), (П8.3), (П8.5)).

Следовательно, значения

$$a_{21}'=\alpha_{21}+\gamma_{21},\quad b_{21}'\geq\alpha_{21},\quad c_{21}=0 \qquad (П8.21)$$

показателей a_{21}', b_{21}', c_{21} можно отнести к допустимым при условии (П8.18).

Пусть

$$a_{21}'\leq c_{21}+\alpha_{21}+\gamma_{21}-1\ . \qquad (П8.22)$$

Тогда

$$\zeta_1=2^{\beta-\delta}Q_{21}\mu_{21}^{a_{21}'}\zeta_1''/\mu_{21}^{\gamma_{21}}\ ,\quad \zeta_2=2^{\beta-\delta}Q_{21}\mu_{21}^{a_{21}'}\zeta_2''/\mu_{21}^{\gamma_{21}} \qquad (П8.23а)$$

$$\zeta_3=0\ . \qquad (П8.23б)$$

Здесь Q_{21} определяется формулой (П8.17);

$$\zeta_1''=2^{\alpha}n_{13}'N_{21}m_{21}+s\eta m_{22}R_-\ ; \qquad (П8.24а)$$

$$\zeta_2''=2^{\alpha}n_{13}'N_{21}m_{22}-s\eta m_{21}R_-\ , \qquad (П8.24б)$$

где R_- определяется формулой (П8.12а).

Предположим, что целочисленные значения функций (П8.24) имеют наибольший общий делитель $\mu_{21}^{r_{21}}$, и примем для них обозначение

$$\zeta_1''=\mu_{21}^{r_{21}}C_1,\quad \zeta_2''=\mu_{21}^{r_{21}}C_2\ , \qquad (П8.25)$$

где r_{21} – неотрицательное целое число; C_1, C_2 – целые числа, не имеющие общего делителя, равного μ_{21}.

Подстановка (П8.25) в (П8.23) приводит к выражениям:

$$\zeta_1=2^{\beta-\delta}Q_{21}\mu_{21}^{a_{21}'+r_{21}}C_1/\mu_{21}^{\gamma_{21}}\ ,\ \zeta_2=2^{\beta-\delta}Q_{21}\mu_{21}^{a_{21}'+r_{21}}C_2/\mu_{21}^{\gamma_{21}} \qquad (П8.26)$$

Множитель $\mu_{21}^{\gamma_{21}}$ в знаменателях формул (П8.26) сократим, если $a_{21}'+r_{21}\geq\gamma_{21}$.

При $a_{21}'+r_{21}=\gamma_{21}$ целочисленные значения функций (П8.26) не имеют общего делителя, равного μ_{21} в натуральной степени. Координаты (5.27) в этом случае выражаются формулами:

$$n_1'=2^{\beta-\nu}\eta_k\mu_1(\mu_2/\mu_{21}^{\alpha_{21}})\mu_3\mu_{21}^{\alpha_{21}}\ ,\quad n_2'=2^{\beta-\lambda-\nu}|U_{21}'|N''\ ,$$

где U_{21}', N'' определяются формулами (П8.4), (П8.5), и могут принимать целочисленные значения, не имеющие общего делителя, равного μ_{21}, при взаимно простых N'' и μ_{21}, что возможно, когда

$$r_{21}=\gamma_{21} \qquad (П8.27а)$$

при

$$a'_{21} = 0,\quad b'_{21} \ge 0, \tag{П8.27б}$$

и когда

$$r'_{21} = \gamma_{21} - a'_{21} \tag{П8.27в}$$

при

$$1 \le a'_{21} \le \gamma_{21},\quad b'_{21} = 0,\quad (\gamma_{21} \ge 1). \tag{П8.27г}$$

Значения показателя a'_{21}, выделенные условиями (П8.27б), (П8.27г), согласуются с условием (П8.22) при $c_{21} \ge 0$.

Пусть $a'_{21} + r_{21} \ge \gamma_{21} + 1$. Тогда целочисленные значения функций (П8.26) имеют наибольший общий делитель $d = \mu_{21}^{a'_{21}+r_{21}-\gamma_{21}} \ge \mu_{21}$. Координаты (5.27) и функции (5.22) в этом случае выражаются формулами:

$$n'_1 = 2^{\beta-\nu}\eta_k\mu_1(\mu_2/\mu_{21}^{\alpha_{21}})\mu_3\mu_{21}^{\alpha_{21}+\gamma_{21}}/\mu_{21}^{a'_{21}+r_{21}}, \tag{П8.28}$$

$$n'_2 = 2^{\beta-\lambda-\nu}|U'_{21}|\mu_{21}^{\gamma_{21}}N''/\mu_{21}^{a'_{21}+r_{21}},$$

$$\tilde{\xi}_{11} = \tilde{\xi}'_{11}/\mu_{21}^{\alpha_{21}},\quad \tilde{\xi}_{12} = \tilde{\xi}'_{12}/\mu_{21}^{\alpha_{21}},\quad \tilde{\xi}_{13} = 2^{\beta-\lambda}U'_{21}N''. \tag{П8.29}$$

Здесь

$$\tilde{\xi}'_{11} = \frac{\eta_k}{2^{\beta}\mu_1(\mu_2/\mu_{21}^{\alpha_{21}})\mu_3}(\mu_{21}^{a'_{21}+r_{21}-\gamma_{21}}2^{\beta-\delta}Q_{21}C_1 - 2^{\beta-\lambda}m_{21}|U'_{21}|N''); \tag{П8.30а}$$

$$\tilde{\xi}'_{12} = \frac{\eta_k}{2^{\beta}\mu_1(\mu_2/\mu_{21}^{\alpha_{21}})\mu_3}(\mu_{21}^{a'_{21}+r_{21}-\gamma_{21}}2^{\beta-\delta}Q_{21}C_2 - 2^{\beta-\lambda}m_{22}|U'_{21}|N''); \tag{П8.30б}$$

$$N'' = \begin{cases} \mu_{21}^{a'_{21}}N'_-, & \text{если } b'_{21} \ge a'_{21}+1, \\ \mu_{21}^{a'_{21}+r'_{21}}N'_{00}, & \text{если } b'_{21} = a'_{21}, \\ \mu_{21}^{b'_{21}}N'_+, & \text{если } b'_{21} \le a'_{21}-1, \end{cases} \tag{П8.31}$$

где N'_-, N'_+ определяются формулами (П8.6а), (П8.6в) и предполагается, что значения функции (П8.6б) имеют наибольший делитель, равный $\mu_{21}^{r'_{21}}N'_{00}$ с неотрицательным показателем степени r'_{21}, т. е.

$$N'_0 = \mu_{21}^{r'_{21}}N'_{00}. \tag{П8.32}$$

Множитель $\mu_{21}^{a'_{21}+r'_{21}}$ в знаменателе формулы (П8.28) сократим, если

$$a'_{21} + r_{21} \le \alpha_{21} + \gamma_{21},$$

$$0 \le a'_{21} \le \alpha_{21} + \gamma_{21}. \tag{П8.33}$$

Пусть

$$a'_{21} + r_{21} = \alpha_{21} + \gamma_{21} \ . \tag{П8.34}$$

Тогда множитель $\mu_{21}^{\alpha_{21}}$ в знаменателях формул (П8.29) сократим, если значения функции (П8.31) имеют делитель, равный $\mu_{21}^{\alpha_{21}}$. Этому условию отвечают:

$$r_{21} = \alpha_{21} + \gamma_{21} - a'_{21} \tag{П8.35}$$

(см. (П8.34)) и

$$\alpha_{21} \le a'_{21} \le \alpha_{21} + \gamma_{21}, \quad b'_{21} \ge a'_{21} \tag{П8.36}$$

(см. (П8.33)) при

$$r'_{21} \ge 0, \tag{П8.37}$$

(см. (П8.32)), а также

$$0 \le a'_{21} \le \alpha_{21} - 1, \quad b'_{21} = a'_{21} \tag{П8.38}$$

при

$$1 \le r'_{21} \le \alpha_{21} - a'_{21} \ . \tag{П8.39}$$

Пусть

$$a'_{21} + r_{21} \le \alpha_{21} + \gamma_{21} - 1 \ .$$

Тогда множитель $\mu_{21}^{\alpha_{21}}$ в знаменателях формул (П8.29) сократим, если значения функции (П8.31) имеют наибольший делитель, равный $\mu_{21}^{a'_{21}+r_{21}-\gamma_{21}}$, а целочисленные значения функций (П8.30) – наибольший общий делитель, равный $\mu_{21}^{\alpha_{21}}$. Первое из указанных условий выполняется при

$$r'_{21} = 0 \tag{П8.40а}$$

(см. (П8.32)), когда

$$r_{21} = \gamma_{21} \ , \tag{П8.40б}$$

$$0 \le a'_{21} \le \alpha_{21} - 1, \quad b'_{21} \ge a'_{21} \tag{П8.41}$$

или

$$r_{21} = b'_{21} + \gamma_{21} - a'_{21} \ , \tag{П8.42}$$

$$0 \le b'_{21} \le \alpha_{21} - 1, \quad b'_{21} + 1 \le a'_{21} \le b'_{21} + \gamma_{21}, \quad (\gamma_{21} \ge 1), \tag{П8.43}$$

а также при

$$r'_{21} = r_{21} - \gamma_{21} \ , \tag{П8.44}$$

когда

$$r_{21} \ge \gamma_{21} + 1 \ , \tag{П8.45}$$

$$0 \le a'_{21} \le \alpha_{21} - 2, \quad b'_{21} = a'_{21}. \tag{П8.46}$$

Если же не принимать во внимание свойств делимости на μ_{21} целочисленных значений (см. формулы (П8.25), (П8.32)) функций (П8.24), (П8.6б), выражаемых требованиями (П8.27а), (П8.27в), (П8.35), (П8.37), (П8.39), (П8.40), (П8.42), (П8.44), (П8.45), и целочисленных значений функций (П8.30), которые проверяемы непосредственно при вычислениях, то к допустимым при условии (П8.22) можно отнести значения a'_{21}, b'_{21} из области, определяемой неравенствами:

$$0 \le a'_{21} \le b'_{21} + \gamma_{21}, \quad 0 \le b'_{21} \le \alpha_{21}, \tag{П8.47а}$$

$$0 \le a'_{21} \le \alpha_{21} + \gamma_{21}, \quad b'_{21} \ge \alpha_{21} + 1 \tag{П8.47б}$$

(см. формулы (П8.27б), (П8.27г), (П8.36), (П8.38), (П8.41), (П8.43), (П8.46)), причем эта область содержит значения a'_{21}, b'_{21} (П8.21), выделенные при условии (П8.18).

Итак, зависимость переменных (5.19), (5.20) и параметра (5.21) от μ_{21} можно учесть явным образом, выражая множители (П8.1), входящие в (5.19) – (5.21), в виде функций

$$n''_{13} = \mu_{21}^{\alpha_{21}+a'_{21}} N_{21}, \quad n''_{g} = \mu_{21}^{\alpha_{21}+b'_{21}} G_{21}, \quad k'' = \mu_{21}^{c_{21}} K_{21}$$

целочисленных показателей степени a'_{21}, b'_{21}, c_{21}, где $c_{21} \ge 0$; N_{21}, G_{21}, K_{21} определяются формулами (П8.2). Показатели степени a'_{21}, b'_{21} связаны с показателями степени a_{21}, b_{21} формулами (П8.9); их значения принадлежат области (П8.47), которую удобно задать неравенствами:

$$0 \le a'_{21} \le \gamma_{21} - 1, \quad b'_{21} \ge 0,$$

$$\gamma_{21} \le a'_{21} \le \gamma_{21} + \alpha_{21}, \quad b'_{21} \ge a'_{21} - \gamma_{21},$$

где значения показателей степени α_{21}, γ_{21} определяются формулами (П8.13).

Приложение 9

Зависимость переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от множителей, входящих в разложение Δ на простые множители

Предположим, что в произведении (4.50б) множитель Δ_1 отличен от единицы, переменные n'_{13}, n'_g, параметр k' и Δ_1 – взаимно простые,

$$n''_{13} = \Delta_1^{a_1}N_1\ ,\quad n''_g = \Delta_1^{b_1}G_1\ ,\quad k'' = \Delta_1^{c'_1}K_1\ , \qquad (\text{П}9.1)$$

где a_1, b_1, c'_1 неотрицательные числа;

$$N_1 = M_1^{\lambda_1/2}\mu_{11}^{a_{11}}\mu_{21}^{\alpha_{21}+a'_{21}}\mu_{31}^{\alpha'_{31}/2+a'_{31}}N\ ;$$

$$G_1 = M_1^{\lambda_1/2}\mu_{11}^{b_{11}}\mu_{21}^{\alpha_{21}+b'_{21}}\mu_{31}^{\alpha'_{31}/2+a'_{31}}G\ ;$$

$$K_1 = M_1^{c_1}\mu_{11}^{c_{11}}\mu_{21}^{c_{21}}\mu_{31}^{c_{31}}K\ .$$

Здесь N, G, K – нечетные натуральные числа, взаимно простые с $M_1, \mu_{11}, \mu_{21}, \mu_{31}, \Delta_1$.

Функция (5.24) выражается через переменные a_1, c'_1 формулой

$$|k|\beta c = \begin{cases} \Delta_1^{a_1}R_-, \text{ если } a_1 \le c'_1 + \gamma_1 - 1, \\ \Delta_1^{c'_1+\gamma_1}R, \text{ если } a_1 = c'_1 + \gamma_1, \\ \Delta_1^{(a_1+c'_1+\gamma_1)/2}R_+, \text{ если } a_1 \ge c'_1 + \gamma_1 + 1, \end{cases} \qquad (\text{П}9.2)$$

где

$$R_- = \sqrt{2^\alpha n'_{13}N_1(A_1 + \Delta_1^{c'_1+\gamma_1-a_1}B_1)}\ ; \qquad (\text{П}9.3\text{а})$$

$$R = \sqrt{2^\alpha n'_{13}N_1(A_1 + B_1)}\ ; \qquad (\text{П}9.3\text{б})$$

$$R_+ = \sqrt{2^\alpha n'_{13}N_1(\Delta_1^{a_1-c'_1-\gamma_1}A_1 + B_1)}\ . \qquad (\text{П}9.3\text{в})$$

Здесь $A_1 = 2^\alpha An'_{13}N_1$; $B_1 = 2^{\delta+r}k'K_1B/\Delta_1^{\gamma_1}$, где A, B определяются формулами (5.31а); $\gamma_1 = 1, 2, \ldots$ (см. формулу (4.50б)); A_1, B_1 и Δ_1 – взаимно простые.

Пусть

$$a_1 \ge c'_1 + \gamma_1 + 1\ ,$$

где $c'_1 \ge 0$.

Тогда функция (П9.2) может принимать целочисленные значения, если

$$a_1 \ge c'_1 + \gamma_1 + 2\ , \qquad (\text{П}9.4)$$

где a_1 – четное при четном $c_1' + \gamma_1$ и нечетное при нечетном $c_1' + \gamma_1$.

Функции (5.25) в этом случае выражаются формулами:

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} dQ_1\zeta_1'', \ \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} dQ_1\zeta_2'', \ \zeta_3 = 0, \qquad (П9.5)$$

В формуле (П9.5)

$$Q_1 = \Delta_1^{\gamma_1} Q \ , \qquad (П9.6)$$

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha} \Delta_1^{(a_1 - c_1' - \gamma_1)/2} n_{13}' N_1 m_{21} + s\eta m_{22} R_+ \ ,$$

$$\zeta_2'' = 2^{\alpha} \Delta_1^{(a_1 - c_1' - \gamma_1)/2} n_{13}' N_1 m_{22} - s\eta m_{21} R_+ \ ,$$

где Q и R_+ определяются формулами (5.31б), (П9.3в); $(a_1 - c_1' - \gamma_1)/2 \geq 1$ в силу неравенства (П9.4), т. е. ζ_1'', ζ_2'' и Δ_1 – взаимно простые.

Целочисленные значения функций (П9.5) имеют общий делитель $d = \Delta_1^{(a_1 + c_1' - \gamma_1)/2}$, где $(a_1 + c_1' - \gamma_1)/2 \geq c_1' + 1 \geq 1$ в силу неравенства (П9.4). Координата n_1' (см. первую из формул (5.27)) при таком d целочисленной быть не может, так как $\mu_1\mu_2\mu_3$ и Δ_1 – взаимно простые.

Пусть

$$a_1 = c_1' + \gamma_1 \ , \qquad (П9.7)$$

где $c_1' \geq 0$.

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} dQ_1\zeta_1'', \ \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} dQ_1\zeta_2'', \ \zeta_3 = 0, \qquad (П9.8)$$

где

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha} n_{13}' N_1 m_{21} + s\eta m_{22} R \ ; \ \zeta_2'' = 2^{\alpha} n_{13}' N_1 m_{22} - s\eta m_{21} R \ ;$$

Q_1 и R определяются формулами (П9.6), (П9.3б).

Целочисленные значения функций (П9.8) имеют общий делитель $d = \Delta_1^{c_1'}$. Координата n_1' при таком d может принимать целочисленные значения, если $c_1' = 0$. Следовательно, при условии (П9.7) допустимы

$$\alpha_1 = \gamma_1, \ b_1 \geq 0, \ c_1' = 0. \qquad (П9.9)$$

Заметим, однако, что это заключение справедливо, если целочисленные координаты m_{21}, m_{22} задаваемого вектора $\mathbf{X}_2$ не имеют общего делителя, равного Δ_1 в натуральной степени, т. е. при взаимно простых m_{21}, m_{22} и Δ_1 (см. формулы (4.51), (4.50б)). Если же m_{21}, m_{22} и Δ_1 взаимно простыми не являются, то они должны иметь наибольший общий делитель $\Delta_1^{\gamma_1/2}$, где $\gamma_1 = 2, 4, 6, \ldots$. В этом случае целочисленные значения функций (П9.8) имеют общий делитель $d = \Delta_1^{c_1' + \gamma_1/2}$ и значения координаты n_1' целочисленными быть уже не могут.

Пусть

$$a_1 \le c_1' + \gamma_1 - 1, \; c_1' \ge 0 . \qquad (П9.10)$$

Тогда

$$\zeta_1 = 2^{\beta-\delta} Q_1 \Delta_1^{a_1} \zeta_1'' / \Delta_1^{\gamma_1} \; , \quad \zeta_2 = 2^{\beta-\delta} Q_1 \Delta_1^{a_1} \zeta_2'' / \Delta_1^{\gamma_1} \; , \quad \zeta_3 = 0 \; . \qquad (П9.11)$$

В (П9.11) Q_1 определяется формулой (П9.6);

$$\zeta_1'' = 2^{\alpha} n_{13}' N_1 m_{21} + s\eta m_{22} R_- \; ; \; \zeta_2'' = 2^{\alpha} n_{13}' N_1 m_{22} - s\eta m_{21} R_- \; , \quad (П9.12)$$

где R_- определяется формулой (П9.3а).

Область изменения целочисленных переменных a_1, c_1', задаваемую неравенствами (П9.10), удобно разбить на две части:

$$\gamma_1 \le a_1 \le c_1' + \gamma_1 - 1, \quad c_1' \ge 1, \qquad (П9.13а)$$

$$0 \le a_1 \le \gamma_1 - 1, \quad c_1' \ge 0 . \qquad (П9.13б)$$

Множитель $\Delta_1^{\gamma_1}$ в знаменателях формул (П9.11) сократим и целочисленные значения функций (П9.12) не имеют общего делителя, равного Δ_1 в натуральной степени, в следующих случаях:

1) при a_1, c_1' из области (П9.13а), если

$$\alpha_1 = \gamma_1, \; c_1' \ge 1, \qquad (П9.14)$$

m_{21}, m_{22} и Δ_1 – взаимно простые;

2) при a_1, c_1' из области (П9.13б), если целочисленные значения функций (П9.12) имеют наибольший общий делитель $\Delta_1^{s_1}$, где $s_1 = \gamma_1 - a_1$, значения s_1 удовлетворяют неравенствам

$$1 \le s_1 \le \gamma_1 \; ,$$

при взаимно простых m_{21}, m_{22} и Δ_1 или неравенствам

$$\gamma_1 / 2 \le s_1 \le \gamma_1 \; ,$$

если m_{21}, m_{22} – целые числа вида

$$m_{21} = \Delta_1^{\gamma_1/2} m_{21}' \; , \; m_{22} = \Delta_1^{\gamma_1/2} m_{22}' \; ,$$

где m_{21}', m_{22}' и Δ_1 – взаимно простые.

Если же не принимать во внимание свойства делимости координат m_{21}, m_{22} вектора $\mathbf{X}_2$ и целочисленных значений функций (П9.12) на Δ_1, то область допустимых значений целочисленных показателей степени a_1, b_1, c_1' в формулах (П9.1), выражающих зависимость переменных n_{13}, n_g и параметра $|k|$ от множителя Δ_1, входящего в произведение (4.50б), можно определить неравенствами

$$0 \le a_1 \le \gamma_1 , \; b_1 \ge 0 , \; c_1' = 0$$

(см. формулы (П9.9), (П9.14), (П9.13б)).

Оглавление

Научное издание

Верещагин Владимир Пантелеевич
Горелов Евгений Николаевич
Кислов Алексей Николаевич

Кристаллография ориентационных инвариантов однородного деформационного преобразования ГЦК → ОЦК (ОЦТ) кристаллических решеток при собственно деформации ГЦК-решетки по Бейну

Редактор Н.М. Юркова

Печатается по постановлению
редакционно-издательского совета университета

Подписано в печать 27.12.06. Формат 60x84 1/16. Бумага для множ. аппаратов. Усл. печ. л. 11,4. Уч.-изд. л. 12,3. Тираж 100 экз. Заказ № 46.
Издательство ГОУ ВПО «Российский государственный профессионально-педагогический университет». Екатеринбург, ул. Машиностроителей, 11.

Ризограф ГОУ ВПО «Российский государственный профессионально-педагогический университет». Екатеринбург, ул. Машиностроителей, 11.